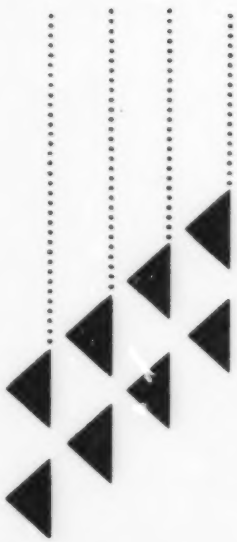
Santé et Bien-être social Canada
Health and Welfare Canada

Étude et analyse critique de modèles pour l'évaluation de l'exposition des humains aux substances chimiques



Canada

92-07186/

Étude et analyse critique de modèles pour l'évaluation de l'exposition des humains aux substances chimiques

Direction de l'hygiène du milieu
Direction générale de la protection de la santé

Publication autorisée par le
ministre de la Santé nationale et du Bien-être social
Avril 1991

Also available in English under the title
A Survey and Critical Review of Models to Assess Human Exposure to Chemicals

On peut obtenir des exemplaires de ce rapport auprès de la :
Direction générale des communications
Ministère de la Santé nationale et du Bien-être social
19e étage
Immeuble Jeanne-Mance
Ottawa (Ontario)
K1A 0K9

© Ministre des Approvisionnements et Services Canada, 1992
N° de cat. H49-74/1991F
ISBN 0-662-97236-8

EHD-TR-155

Remerciements

Un rapport préparé par Donald Mackay et Sally Peterson de l'Institute for Environmental Studies de l'Université de Toronto pour la Direction générale de la protection de la santé du ministère de la Santé nationale et du Bien-être social.

Résumé

En vertu de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement* (LCPE), les produits chimiques nouvellement introduits au Canada être évalués en fonction des renseignements fournis par leur fabricant ou importateur sur leur propriétés physiques, chimiques et toxicologiques ainsi que sur le type d'usage auquel ils sont destinés. Dans le cadre du processus d'évaluation, on peut avoir recours à des modèles informatiques pour estimer la nature et l'étendue de l'exposition des humains découlant de l'utilisation commerciale de ces produits chimiques. Le gouvernement fédéral ne disposant pas de modèles pouvant être immédiatement mis en application, le présent rapport examine les modèles ou les approches de modélisation en cours d'utilisation ou de développement dans d'autres juridictions. Une recherche de la documentation et des contacts auprès des principaux organismes ont mené à la sélection des humains aux nouveaux produits chimiques. Nous décrivons ces modèles et examinons leurs forces et leurs faiblesses. Aucun modèle existant ne peut être adopté immédiatement par Santé et Bien-être social Canada ni être mis en application dans le cadre de la LCPE, mais il devrait être possible de constituer, en l'espace d'un ou deux ans, un modèle conforme aux exigences de Santé et Bien-être social Canada et pouvant être appliqué aux besoins spécifiques des conditions canadiennes, par l'adaptation de différents modules des modèles existants. Nous définissons un programme permettant d'atteindre cet objectif et formulons des recommandations relatives à l'approche optimale.

Table des matières

		Page
1.	**Introduction**	7
1.1	General	7
1.2	Approche adoptée dans le présent rapport	11
2.	**Inventaire des modèles et des approches**	13
2.1	Le processus de recherche	13
2.2	Inventaire des modéles	15
	A: GEOTOX	15
	B: RAPS – Remedial Action Priority System	18
	C: Multi-Phase Non-Steady State Equilibrium (MNSEM)	25
	D: Persistance	28
	E: Environmental Exposure Potentials (EEP)	32
	F: Environmental Partitioning Model (ENPART)	34
	G: TOXSCREEN	35
	H: Exposure Commitment Method	36
	I: Preliminary Pollutant Limit Value (PPLV)	37
	J: Modèles basés sur la fugacité	40
	K: SIMPLESAL	42
	L: AERIS – Aid for Evaluating the Redevelopment of Industrial Sites	43
	M: Modèle compartimental multimédia (MCM)	45
3.	**Évaluation critique**	46
3.1	Tableau récapitulatif	46
3.2	Ces modèles peuvent-ils être utilisés dans le cadre de la LCPE?	49
3.3	De quel type de modèle a-t-on besoin?	49
3.3.1	La nature des modéles	49
3.3.2	Considérations sur à la réglementation canadienne	50
3.3.3	Considérations sur à la géographie canadienne	50
3.3.4	Modèles basés sur la fugacité et la teneur	51
3.4	Que devrait faire Santé et Bien-être social Canada	51
4.	**Conclusions**	54
Références et bibliographie		55
Annexe		57
Références de l'annexe		63

Liste des tableaux

		Page
1.1	Niveau «intermédiaire» des informations exigées	8
1.2	Niveau «intégral» des informations exigées	9
2.1	Draft Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods for Chemicals	13
A.1	Doses quotidiennes prédites pour les sept voies d'exposition après le rejet de 1 mol/km^3-an de chaque contaminant dans le compartiment supérieur du sol	17
A.2	Comparaison des débits de dose de contaminants estimés pour toutes les voies d'exposition et des doses virtuellement sans danger (DVSD)	17
C.1	Résumé du devenir dans l'environnement du naphtalène, évalué à l'aide du modèle multiphases à l'équilibre dans des conditions constantes	27
D.1	Paramètres d'entrée du modèle de persistance	30
D.2	Prédiction des voies de distribution et de dégradation de l'hexachlorobenzène en régime permanent à l'aide du modèle de persistance et des paramètres de l'étang standard et du lac standard	30
E.1	Imprimé des données d'entrée et des résultats	33

		Page
H.1	Niveaux de plomb dans l'environnement et chez les humains	36
I.1	Fiche de travail du modèle PPLV	39
I.2	Symboles et abréviations employés dans les calculs	39
J.1	Concentrations calculées et relevées pour les quatre phases générales, les poissons, et les fugacités des phases générales	41
3.1	Tableau récapitulatif des modèles et de leurs caractéristiques	47
3.2	Résumé des méthodes quantitatives	57

Liste des figures

1.1	Processus de devenir dans l'environnement	12
A.1	Schéma conceptuel des principaux compartiments, phases et voies considérés dans la méthodologie de sélection	16
A.2	Schéma du modèle de la voie bétail/ viande/produits laitiers	16
B.1	Schéma simplifié illustrant les interactions entre les voies de transport et les éléments de l'évaluation de l'exposition de la méthodologie RAPS	19
B.2	Voies d'exposition considérées dans le modèle RAPS	20
B.3	Voies d'exposition de l'homme	21
C.1	Schéma du devenir dans l'environnement	26
D.1	Schéma élémentaire du modèle de persistance	29
D.2	Accumulation d'hexachlorobenzène avant, pendant et après l'instauration du régime permanent dans les compartiments de l'étang standard et du lac standard du modèle de persistance	31
E.1	Profil des paramètres	33
I.1	Voies conduisant du sol à l'homme, via les compartiments eau, plantes et animaux	38
K.1	Processus du modèle SIMPLESAL	43
3.1	Suggestion pour la délimitation de régions en vue de l'évaluation au Canada	53

1. Introduction

1.1 Général

En vertu de la *Loi canadienne sur la protection de l'environnement*, promulguée en 1988, Environnement Canada et Santé et Bien-être social Canada se doivent d'évaluer le devenir dans l'environnement, les effets de l'exposition des humains aux produits chimiques nouvellement introduits au Canada. Aux États-Unis, environ 1 000 nouveaux produits chimiques sont soumis pour fins d'évaluation chaque année; toutefois, ce chiffre sera vraisemblablement moins élevé au Canada, soit peut-être de l'ordre de 100 à 200 par an. Cependant, il peut être trompeur de comparer les deux pays, du fait des différences existant sur le plan des exigences relatives à la déclaration des produits et des quantités devant être déclarées. Pour parvenir à évaluer l'exposition humaine et, en fin de compte, le risque, il faudra élaborer une procédure clairement définie, rigoureuse sur le plan scientifique et généralement acceptable pour le traitement des données disponibles sur les propriétés et la toxicité des produits chimiques. Idéalement, cette procédure devrait être d'un accès facile, de sorte que les compagnies prévoyant la mise en marché d'un produit chimique donné puissent déterminer à l'avance la réponse probable de l'organisme chargé de la réglementation. Une solution intéressante consiste à utiliser un ou plusieurs modèles informatiques pour procéder à cette évaluation; en effet, les modèles réduisent au minimum le facteur de jugement personnel, réduisent la probabilité d'erreur humaine durant le processus d'évaluation et fournissent rapidement des résultats reproductibles.

L'approche privilégiée est l'utilisation de modèles mécanistiques, où les données d'entrée servent à calculer les tendances du devenir des produits chimiques dans l'environnement; on obtient ainsi une estimation des concentrations dans les différents compartiments tels que l'air, l'eau, le sol, les poissons, les sédiments et la végétation. À partir de ces concentrations, on peut évaluer la présence des produits chimiques dans les milieux conduisant à l'exposition des personnes (air, eau et denrées alimentaires) ainsi que les doses totales auxquelles sont exposés les êtres humains en une unité donnée, par exemple, en microgrammes par jour. On peut également relier ces modèles à des modèles pharmacocinétiques décrivant le devenir des produits chimiques dans l'organisme humain, afin d'être en mesure d'estimer les concentrations des produits chimiques dans les tissus cibles. Le présent rapport s'intéresse principalement aux modèles de ce type général, lequel peut varier considérablement sur le plan de la complexité, des régions géographiques d'application, et de l'accent mis sur différentes voies d'exposition des humains. Un deuxième type d'approche est le recours à des systèmes d'attribution de cotes dans lesquels les données d'entrée sont converties en cotes indiquant le niveau de danger perçu, lesquelles sont combinées pour donner une cote totale représentant la gravité de l'exposition ou de l'effet. Un exemple d'une telle approche est le système vectoriel de l'Ontario, que l'on utilise pour établir la liste des polluants prioritaires dans cette province. Bien que de tels systèmes soient plus faciles à utiliser et à comprendre, ils ne fournissent aucune estimation quantitative de l'exposition humaine. Ils n'identifient pas de voie spécifique d'exposition et, dans certains cas, peuvent donner des résultats trompeurs. Leur principale application est la constitution de listes de produits chimiques prioritaires et la sélection de ceux qui méritent des études plus approfondies. Dans le présent rapport, nous ne considérerons que brièvement ce type de modèle.

Le type de renseignements sur les propriétés des produits chimiques exigés en vertu de la LCPE varie selon que la substance est répertoriée dans la liste des substances à usage domestique ou dans celle des substances à usage non domestique; il dépend également de la quantité de la substance devant être fabriquée ou importée chaque année. Ces listes sont en cours de compilation au ministère de l'Environnement. On a établi trois niveaux d'exigences en matière de renseignements, sont élémentaires, intermédiaires et intégrales. Dans le présent rapport, nous ne considérerons que les exigences intermédiaires et intégrales, dont on trouvera la description aux tableaux 1.1 et 1.2. La principale fonction d'un modèle est d'utiliser les données obtenues sur la base de ces exigences pour calculer les caractéristiques de répartition dans l'environnement, les teneurs dans les milieux d'exposition et les concentrations dans les tissus des humains exposés à ces produits chimiques. La figure 1.1. est une illustration de la nature de certaines des voies d'exposition les plus importantes des personnes dans l'environnement. On peut considérer le modèle

comme un outil permettant d'estimer la quantité et la concentration des produits chimiques résidant dans les milieux illustrés à la figure 1.1, ainsi que les quantités circulant le long des différentes voies conduisant à un récepteur humain typique.

Tableau 1.1
Niveau «intermédiaire» des informations exigées

1. (a) Nom chimique de la substance, établi conformément aux règles de nomenclature chimique de l'Union internationale de chimie pure et appliquée ou du Chemical Abstract Service.

   (b) Nom commercial ou synonymes du nom chimique, s'ils sont connus.

   (c) Numéro d'inscription du Chemical Abstract Service pour la substance, si un tel numéro peut lui être attribué.

   (d) Formule développée et poids moléculaire en grammes de la substance; degré de pureté du produit technique s'il est disponible; impuretés connues et concentration par unité de poids; enfin, additifs et agents stabilisateurs essentiels à la commercialisation, ainsi que leur concentration par unité de poids.

   (e) Fiches techniques santé-sécurité de la substance, si disponibles, telles que définies dans la *Loi sur les produits dangereux*.

2. (a) Les données chimiques et physiques suivantes : point de fusion, point d'ébullition, masse volumique, tension de vapeur, solubilité dans l'eau, coefficient de partage octanol-eau, absorption aux infrarouges et ultra-violets, spectre de masse ou de résonance magnétique nucléaire pour la caractérisation de la substance; constante de dissociation, données expérimentales des tests de sélection par adsorption et désorption; hydrolyse en fonction du pH et, si possible, identification des produits de l'hydrolyse; enfin, données sur la distribution granulométrique ou la distribution des longueurs des fibres, le cas échéant.

   (b) Données expérimentales provenant d'un test de toxicité aiguë sur des mammifères par voie orale, cutanée ou par inhalation, qui représente la voie la plus caractéristique de l'exposition humaine possible à la substance.

   (c) Âge, sexe, nombre, espèce, souche et sources des animaux utilisés pour les essais; voie et conditions d'administration; enfin, dose, concentration et véhicule des substances étudiées pour le test mentionné au sous-paragraphe 2(2).

   (d) Tous les autres renseignements et données expérimentales pertinents à l'identification des dangers pour l'environnement et pour la santé que l'on peut fournir, ou auxquels on devrait en principe avoir accès.

   (e) Description ou spécification des procédures de laboratoire suivies pour obtenir les données expérimentales incluant, pour les données obtenues après l'entrée en vigueur de ces règlements ou pour les procédures d'essai qui ne sont pas prescrites, les méthodes d'essai, les substances de référence, ainsi que les procédures de contrôle et d'assurance de la qualité.

3. (a) Renseignements relatifs à la fabrication, à l'importation, à l'usage et à l'élimination, incluant les tarifs annuels de fabrication et d'importation, le type d'usage prévu ainsi que les méthodes recommandées pour la manipulation, le transport, l'entreposage, la destruction ou l'élimination de la substance.

   (b) La nature prévue et l'étendue des émissions et des déversements de la substance dans l'environnement.

   (c) L'estimation du nombre de personnes, s'il est connu, qui risquent d'être exposées à la substance.

4. Identification des autres organismes gouvernementaux, étrangers ou canadiens, qui ont été avertis de la fabrication ou de l'importation de la substance, et la raison d'une telle déclaration.

Tableau 1.2
Niveau «intégral» des informations exigées

1. (a) Nom chimique de la substance, établi conformément aux règles de nomenclature chimique de l'Union internationale de chimie pure et appliquée ou du Chemical Abstract Service.

   (b) Numéro d'inscription du Chemical Abstract Service pour la substance, si un tel numéro peut lui être attribué.

   (c) Formule développée et poids moléculaire en grammes de la substance; degré de pureté du produit technique, si approprié; impuretés connues et concentration par unité de poids; enfin, additifs et agents stabilisateurs essentiels à la commercialisation, ainsi que leur concentration par unité de poids.

   (d) Fiches techniques santé-sécurité de la substance, si disponibles, telles que définies dans la *Loi sur les produits dangereux*.

2. (a) Les données chimiques et physiques suivantes : point de fusion, point d'ébullition, masse volumique, pression de vapeur, solubilité dans l'eau, coefficient de partage octanol-eau, absorption aux infrarouges et ultra-violets, spectre de masse ou de résonance magnétique nucléaire pour la caractérisation de la substance; constante de dissociation; données expérimentales des tests de sélection par adsorption et désorption; hydrolyse en fonction du pH et, si possible, identification des produits de l'hydrolyse; enfin, données sur la distribution granulométrique ou la distribution des longueurs des fibres, le cas échéant.

   (b) Données expérimentales provenant d'un test de toxicité aiguë sur des mammifères par voie orale, cutanée, ou par inhalation, qui représente la voie la plus caractéristique de l'exposition humaine possible à la substance.

   (c) Données expérimentales provenant d'un test d'irritation cutanée et d'un test de sensibilisation cutanée.

   (d) Résultats de l'essai de toxicité sur des mammifères avec dose répétée, obtenus par un test d'une durée d'au moins 14 jours (une durée de 28 jours est préférable) représentant la voie la plus caractéristique de l'exposition possible des humains.

   (e) Age, sexe, nombre, espèce, souche et sources des animaux utilisés pour les essais; voie et conditions d'administration; enfin, dose, concentration et véhicule des substances étudiées pour le test mentionné au sous-paragraphe 2(2).

   (f) Résultats des tests de mutagénicité provenant des essais suivants :

   - Un essai *in vitro*, avec et sans activation métabolique, de dépistage de mutations génétiques;

   - Un essai *in vitro*, avec et sans activation métabolique, de dépistage des aberrations chromosomiques dans des cellules de mammifères;

   - Un essai *in vivo* de dépistage des aberrations chromosomiques démontrant l'exposition du tissu testé à la substance ou à ses métabolites à des concentrations suffisantes; et

   - Un essai *in vivo* sur des mammifères pour le dépistage des aberrations chromosomiques, des mutations génétiques, ou tout autre marqueur acceptable dans un autre tissu démontrant l'exposition à la substance ou à ses métabolites à des concentrations suffisantes.

   (g) Résultats des tests de toxicité aiguë sur les poissons et les daphnies, incluant les résultats du test de détermination du seuil ou de la CL_{50}, selon le cas.

   (h) Résultats des tests de biodégradabilité et identification des produits de biodégradation, s'ils sont connus.

   (i) Résultats des essais de bioaccumulation (essai biologique sur les poissons en milieu non renouvelé séquentiel, essai biologique sur les poissons à renouvellement périodique, essai biologique sur les poissons à renouvellement continu).

   (j) Tous les autres renseignements et données expérimentales pertinents à l'identification des dangers pour l'environnement et pour la santé que l'on peut fournir, ou auxquels on devrait en principe avoir accès.

   (k) Description ou spécification des procédures de laboratoire suivies pour obtenir les données expérimentales incluant, pour les données obtenues après l'entrée en vigueur de ces règlements ou pour les procédures d'essai qui ne sont pas prescrites, les méthodes d'essai, les substances de référence, ainsi que les procédures de contrôle et d'assurance de la qualité.

3. (a) Renseignements relatifs à la fabrication, à l'importation, à l'usage et à l'élimination, incluant les tarifs annuels de fabrication et d'importation, le type d'usage prévu ainsi que les méthodes recommandées pour la manipulation, le transport, l'entreposage, la destruction ou l'élimination de la substance.

(b) Précautions et mesures d'urgence recommandées, notamment, équipement protecteur individuel, contrôles techniques, procédures de nettoyage des fuites et des déversements accidentels, procédures de manutention, exigences relatives à l'entreposage, et mesures de premiers soins.

(c) La nature prévue et l'étendue des émissions et des déversements de la substance dans l'environnement.

(d) L'estimation du nombre de personnes, s'il est connu, qui risquent d'être exposées à la substance.

4. Description complète ou spécifications des méthodes analytiques pouvant être utilisées pour la détection et la détermination des concentrations de la substance à un niveau égal ou inférieur à celui de la CL_{50} mentionné au sous-paragraphe 2(7).

5. Identification des autres organismes gouvernementaux, étrangers ou canadiens, qui ont été avertis de la fabrication ou de l'importation de la substance, et la raison d'une telle déclaration.

Lorsquon estime les concentrations à partir des émissions prévues, on se heurte à plusieurs difficultés.

1. La quantité de produits chimiques pénétrant dans l'environnement peut être une fraction extrêmement variable de la quantité réellement fabriquée ou importée.

2. La nature du devenir du produit chimique dans l'environnement dépend du type d'émission, à savoir si le produit chimique est émis dans l'air ou dans le sol, et du degré de localisation de l'émission, à savoir si l'émission est diluée sur une région très étendue et une population importante ou sur un secteur limité et sur une population beaucoup plus exposée.

3. Compte tenu de l'état actuel des connaissances en chimie environnementale, il est difficile de calculer les taux de dégradation dans l'environnement par des procédés tels que la biodégradation, la photolyse et l'oxydation. Les concentrations calculées peuvent donc être complètement erronées, notamment en ce qui concerne les produits chimiques dont la demi-vie est très incertaine.

4. Une voie importante pour l'exposition des humains est la consommation de végétaux, de viande et de produits laitiers. Notre capacité de calculer les concentrations dans la végétation en fonction des teneurs dans l'air et dans le sol est très limitée; par conséquent, les estimations pour ce type de voie d'exposition seraient relativement peu fiables. Parmi les facteurs augmentant le degré de complexité, mentionnons l'utilisation très répandue de denrées alimentaires importées, produites dans des conditions environnementales totalement différentes, et l'altération de niveaux de contaminants due aux techniques de préparation des aliments avant leur consommation par l'homme.

5. Il est difficile et probablement illusoire d'établir un régime alimentaire typiquement canadien, car les habitudes alimentaires varient en fonction du mode de vie, de la situation géographique et de l'âge. Il existe une disparité évidente et importante dans les diverses habitudes alimentaires, notamment en ce qui concenre la proportion de poisson et des végétaux produits à l'intérieur du pays. Toutefois, on ne sait pas exactement de quelle manière la disparité des habitudes alimentaires peut ou doit être prise en considération dans le processus d'évaluation.

En dépit de ces difficultés, il existe d'excellentes raisons pour tenter d'élaborer des procédures ou des modèles de calcul permettant le traitement des données disponibles et d'élucider la nature et l'importance des voies d'exposition prédominantes. Le processus doit être assez simple et compréhensible pour que les utilisateurs ne fassent pas d'erreurs dans l'application des techniques d'estimation. Un programme de formation devrait les aider à se familiariser avec les procédures de calcul employées. Compte tenu du fait que les calculs du devenir des produits chimiques dans l'environnement et de l'exposition peuvent être extrêmement spéculatifs et sujets à erreur, il est manifestement nécessaire de procéder à la validation et à l'essai de tous les modèles susceptibles d'être utilisés, en ayant recours de préférence à divers produits chimiques dont on connaît les taux d'émission, les teneurs dans l'environnement et le degré d'exposition des humains. Cependant, la solution consistant à ne pas utiliser de modèle pour évaluer l'exposition est encore moins acceptable, car elle se fonderait inévitablement sur un simple jugement subjectif des dangers reliés au produit chimique, et ce uniquement sur la base des renseignements fournis par les données d'entrée. Au cours de la prochaine décennie, plusieurs modèles de mesure du devenir dans l'environnement, de l'exposition des humains et de pharmacocinétique permettront probablement de procéder à ces évaluations avec une fiabilité croissante. La présente étude ne doit être considérée que comme une tentative d'orienter les travaux dans l'intervalle.

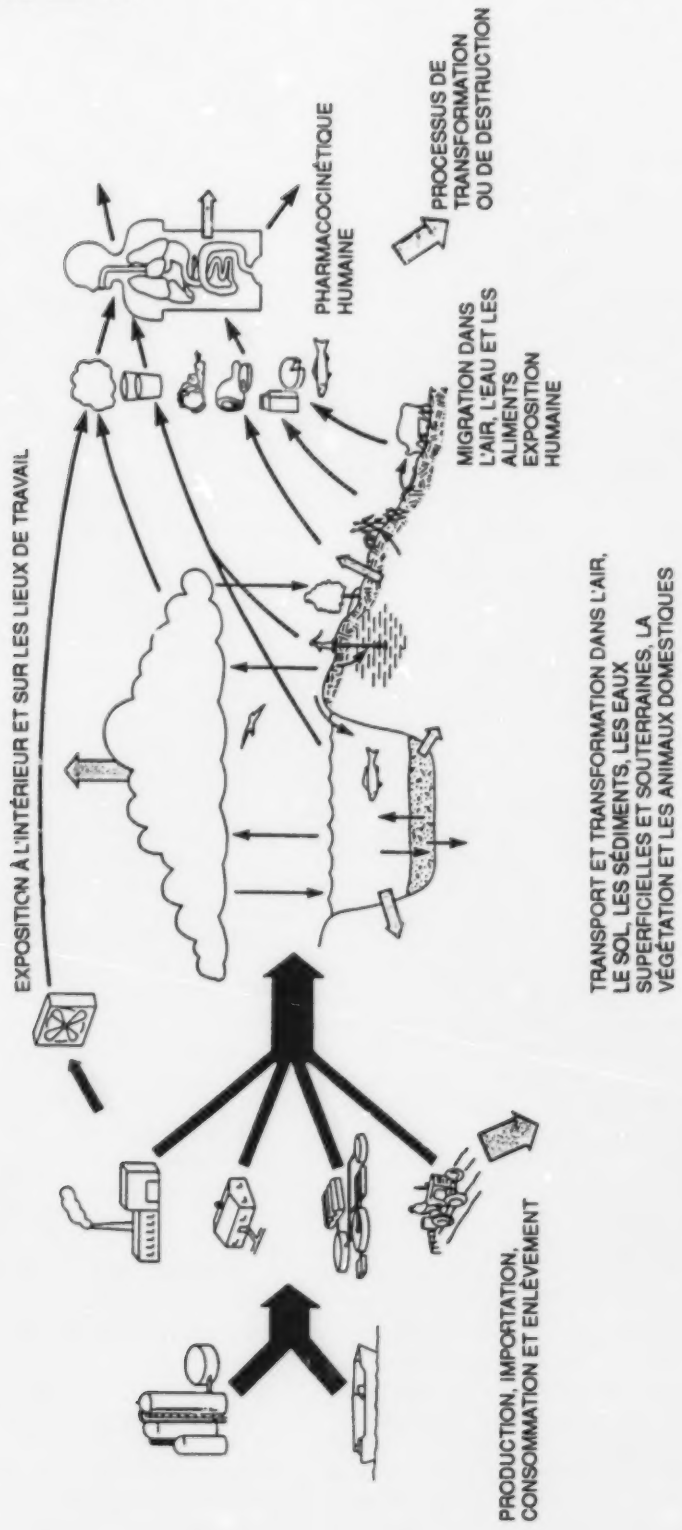
Le principal objet du présent rapport est l'évaluation des produits chimiques organiques, plutôt que celle des métaux ou des composés organométalliques. Le nombre de métaux est bien entendu limité, et les métaux les plus toxiques ont déjà fait l'objet d'un nombre considérable d'études de toxicité pour l'homme et l'environnement. En outre, toute proposition de commercialisation d'un composé du cadmium, par exemple, requiert qu'une évaluation prenne en considération les caractéristiques particulières toxicologiques et environnementales des composés du cadmium. Les modèles généraux de mesure de l'exposition présentent un intérêt moindre pour l'évaluation des composés de ce type. Les modèles sont également d'une utilité restreinte pour l'évaluation de certaines classes de produits chimiques, notamment les polymères, les surfactants, les agents chélatants, les teintures et autres molécules de poids

moléculaire très élevé. Les produits peuvent aussi requérir une évaluation individuelle, du fait que certaines de leurs propriétés physiques ou chimiques telles que la tension de vapeur, le point d'ébullition, la solubilité dans l'eau et le coefficient de partage octanol/eau ne se situent pas toujours dans la gamme des valeurs normalement mesurables.

1.2 Approche adoptée dans le présent rapport

Le chapitre 2 décrit la procédure utilisée lors de la recherche de documentation et des prises de contact avec les organismes qui a permis de rassembler les informations sur les modèles existants. En se fondant sur les références pertinentes obtenues (citées dans la section des références), nous avons sélectionné 20 modèles ou approches de modélisation qui ont été jugés pertinents. Nous décrivons chacun d'eux au chapitre 2. Le chapitre 3 contient une évaluation critique des modèles, où l'on expose leur nature, leur degré de précision, leur acceptation et leur disponibilité. Le chapitre 4 décrit les conclusions auxquelles nous sommes parvenus, ainsi que les recommandations formulées à l'égard de l'approche de modélisation devant être adoptée par Santé et Bien-être social Canada pour l'évaluation de l'exposition des humains aux nouveaux produits chimiques soumis en vertu de la loi.

Figure 1.1
Processus de devenir dans l'environnement


EXPOSITION À L'INTÉRIEUR ET SUR LES LIEUX DE TRAVAIL
PHARMACOCINÉTIQUE HUMAINE
PROCESSUS DE TRANSFORMATION OU DE DESTRUCTION
MIGRATION DANS L'AIR, L'EAU ET LES ALIMENTS EXPOSITION HUMAINE
TRANSPORT ET TRANSFORMATION DANS L'AIR, LE SOL, LES SÉDIMENTS, LES EAUX SUPERFICIELLES ET SOUTERRAINES, LA VÉGÉTATION ET LES ANIMAUX DOMESTIQUES
PRODUCTION, IMPORTATION, CONSOMMATION ET ENLÈVEMENT

2. Inventaire des modèles et des approches

2.1 Le processus de recherche

Au cours des dernières années, un groupe restreint de concepteurs et d'utilisateurs de modèles ont échangé des programmes et des rapports, de sorte que chacun puisse mettre à profit les améliorations apportées par les autres chercheurs. Les informations contenues dans le présent rapport sont principalement le fruit de contacts personnels avec ces individus ou groupes, ainsi que d'une recherche approfondie de la documentation pertinente. Mentionnons en particulier deux conférences organisées à Los Angeles par le National Center for Intermedia Transport Research à l'Université de Californie, ainsi que les congrès de la American Chemical Society et de la Society for Environmental Toxicology and Chemistry, lesquelles ont été à la base de rencontres fructueuses.

Nous sommes également entrés en contact avec des organisations comme la Environmental Protection Agency (EPA), le Department of Energy and Army des États-Unis, le Michigan Department of Natural Resources, la province de l'Ontario et le Lawrence Livermore Laboratory, afin d'obtenir des informations sur les travaux en cours et à venir. Dans la plupart des cas, nous avons obtenu les renseignements sans aucune difficulté.

Nous avons également recueilli des informations précieuses grâce au colloque Human Exposure to Chemicals organisé par l'Université de Toronto et le ministère de l'Environnement de l'Ontario, à Toronto, en décembre 1988.

Le Compendium of Exposure Assessment Methods, récemment compilé par le Chemicals Group and Management Committee Hazard Assessment Panel de l'OCDE, a constitué une source précieuse d'informations. Le tableau 2.1 est une reproduction de la table des matières de ce rapport. On notera que ce rapport porte la mention «à diffusion restreinte».

La compilation des modèles et des approches de modélisation, section 2.2, constitue un inventaire pratiquement exhaustif des modèles existants. Il convient de souligner que l'on s'attend à ce que de nouveaux modèles voient le jour au cours des prochaines années dans ce secteur dynamique. Plus loin dans le présent rapport, nous formulons des recommandations pour les travaux spécifiques de Santé et Bien-être social Canada, de sorte que le Ministère reste au courant des derniers développements dans ce secteur en rapide évolution.

Tableau 2.1
Ébauche du receuil des méthodes d'évaluation de l'exposition environnementale aux produits chimiques (Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods for Chemicals)

General Table of Contents

		Page
PART 1	INTRODUCTION	5
	SUMMARY TABLE OF THE METHODS	13
PART 2	SOURCE ASSESSMENT METHODS	27
101	Product Category Approach	29
102	Assessment of the Environmental Releases of New Chemicals	32
103	Toxic Chemical Release Inventory	34
104	RLTEC Release from the Technosphere	37
105	Source Assessment Using Simple Dilution Models	42
106	Industrial Sources of Water Releases	47
107	Waste Water and Waste from Metal Plating	51
108	Environmental Information and Planning Model (RIM)	53
109	SIMPLETREAT	60
110	Environmental Risk Analysis	62
111	Model for Estimating Two-Phase Discharges of Liquified Gases Through Pipes – TPDIS	65
112	Model for Estimating Two-Phase Tubulent Jets – FLJET	69
PART 3	FATE AND PATHWAYS ASSESSMENT METHODS	75
	WATER METHODS	77
201	River Dilution Model	79
202	Dynamic Toxicity Model (DYNTOX)	85

Tableau 2.1 (suite)

203	Probabilistic Dilution Model – Version 3 (PDM-3)	88
204	Reach Scan	96
205	SARAH A Surface Water Assessment Model for Back Calculating Reductions in Abiotic Hazardous Wastes	104
206	QWASI Model River, Lake Modified	107
207	EXWAT	111
208	Model of Exposure Assessment in Water (MEXWA)	120
209	Geochemical Mass Balances	125
210	MUMM-MU-SLICK	129
211	MUMM-OPIA	132
212	Exposure Analysis Modelling System (EXAMS – Version 2.92)	135
213	Water Analysis Simulation Programme (WASP4)	146
214	Water Quality Model WAQUA	154
215	Density Currents Model – DISTRO	158
216	Xenobiotics Transport and Effect Model based on Detailed Simulation of Hydrodynamics – XTEM	161
217	Three-Dimensional Transport and Influence Model based on Detailed Simulation of Hydrodynamics (Simons-Koponen)	168
	SOIL (GROUNDWATER) METHODS	175
301	Pesticide Estimation Model – PSM	177
302	EXSOL	186
303	Pesticide Root Zone Model (PRZM)	195
304	Seasonal Soil Compartment Model – 4-layer Version (SESOIL-4)	198
305	ONZAT	206
306	SOLUTE	215
307	Analytical, Transient One-, Two- and Three Dimensional Model AT1230	218
308	FLOSA: Flow System Analysis	223
	AIR METHODS	
401	Pesticide Emission and Dispersion Model	227
402	Airborne Pesticide Particles Dispersion Model	229
403	TA-Luft-Ausbreitungsmodell	242
404	EXAIR	247
405	User's Network for Applied Modelling of Air Pollution (UNAMAP)	253
406	MUMM-ATMOS	256
407	EXATM	259
	MULTIMEDIA (MACKAY'S FUGACITY APPROACH) METHODS	265
501	Multimedia Fugacity Models	267
502	Assessment of Risk to Aquatic Biota	275
503	Environmental Exposure Potentials (EEP)	279
504	Fugacity Model (Levels I and II) – Modified	290
505	ENPART – The Environmental Partitioning Model	294
506	SIMPLESAL	307
507	Multi-phase Non-Steady State Equilibrium Model – Version 1.3 (MNSEM 1.3)	318
	MULTIMEDIA (OTHER APPROACHES) METHODS	329
601	SIMPLEBOX	331
602	EXINT	337
603	MINTEQAI Equilibrium Metal Specification Model	343
604	TOXSCREEN	346
605	Simulation for Water Resources in Rural Basins (SWRRB)	366
606	Hydrological Simulation Programme FORTRAN (HSPF)	368
607	Water Quality Assessment: A Screening Procedure for Toxic and Conventional Pollutants in Surface and Groundwaters	373
608	Contaminant Transport (EnviroTIPS Manual 1985)	376
ANNEX I	NOTES FOR PREPARING CONTRIBUTIONS (SOURCE ASSESSMENT METHODS)	383
ANNEX II	NOTES FOR PREPARING CONTRIBUTIONS (FATE AND PATHWAYS ASSESSMENT METHODS0	397
ANNEX III	LIST OF NATIONAL CONTACT POINTS	413

Pour des raisons pratiques, les modèles sont désignés par les lettres A, B, C, etc., et sont présentés individuellement, en même temps que les informations essentielles et un résumé de leur contenu. On trouvera les évaluations et les commentaires généraux à la section 3.

2.2 Inventaire des modèles

Modèle A

Nom :
GEOTOX.

Type de modèle :
Modèle d'exposition multimédia

Référence :
McKone, T.E., Layton, D.W. «Screening the potential risks of toxic substances using a multimedia compartment model: Estimation of human exposure», Regulatory Toxicol. Pharmacol. 6:359-380, 1986.

Personne-ressource :
Dr Tom McKone, Risk Assessment and Environmental Policy, Lawrence Livermore Laboratory, P.O. Box 5507, L-453, Livermore, CA 94550, USA, Téléphone : (415) 422-7535.

Description
GEOTOX est un modèle compartimental exhaustif, élaboré dans le cadre d'un contrat du Department of Energy et de l'armée des États-Unis, qui calcule la répartition des produits chimiques, les réactions de dégradation et les transports interphase de type diffusif et non diffusif. Pour calculer l'exposition, les teneurs estimées pour les différents compartiments environnementaux sont combinées avec les taux d'inhalation et d'ingestion chez l'humain et les facteurs d'absorption appropriés.

On retrouve dans le modèle GEOTOX un environnement évaluatif, représentatif du sud-est des États-Unis, constitué des compartiments suivants : air (gaz), air (particules), biomasse, sol supérieur, sol inférieur, eau souterraine, eau de surface et sédiments. On suppose que ces milieux sont constitués de sous-phases de gaz, liquides et solides. La figure A.1 illustre les compartiments et les voies considérés dans le modèle. Les dimensions et les caractéristiques de l'environnement peuvent être modifiées pour la représentation d'autres régions.

La répartition des produits chimiques entre les différents compartiments, le transport interphase, les pertes par réaction et les pertes advectives sont décrits par des constantes de vitesse de premier ordre. Le modèle est constitué d'un ensemble d'équations différentielles simultanées sous forme matricielle, lesquelles peuvent être résolues pour des sources chimiques constantes ou variant en fonction du temps.

On considère que l'atmosphère, qui est en contact avec le sol et l'eau, est constituée d'une phase de vapeur et d'une phase de particules (aérosol). L'entrée dans ce compartiment peut se faire à partir d'une source ponctuelle ou par transfert diffusif (volatilisation) du sol et de l'eau. Les produits chimiques quittent le compartiment par advection ou par réaction, ou en association avec le dépôt de particules humides ou sèches.

Le compartiment du sol est traité comme un ensemble de trois couches : la couche supérieure du sol, la couche inférieure du sol, et la zone d'eau souterraine. Les couches du sol supérieure et inférieure sont décrites par les paramètres de profondeur, masse volumique en vrac, porosité, teneur en eau et fraction de carbone organique. Le compartiment d'eau souterraine est constitué de solides et de fluides; en d'autres termes, tous les espaces poreux sont occupés par l'eau. Les produits chimiques sont éliminés de la couche supérieure du sol par volatilisation, ruissellement, absorption par les plantes, et lessivage descendant. L'élimination des produits chimiques de la couche inférieure du sol se fait principalement par lessivage descendant. Le transport dans l'eau souterraine est horizontal. Les processus d'adsorption, d'échange d'ions, de précipitation, d'infiltration colloïdale et de minéralisation irréversible dans l'eau souterraine sont incorporés par l'utilisation des constantes et expressions de partitionnement par sorption appropriée.

On considère que la phase aqueuse est constituée de l'eau, de la biote, et de solides en suspension en équilibre. Les solides pénètrent dans l'eau sous l'action du dépôt atmosphérique et de l'érosion superficielle, et en sortent par advection et par sédimentation. Les liquides y pénètrent sous l'effet du ruissellement, des chutes de pluie et du déversement dans l'eau souterraine et la quittent par advection et par sédimentation. Le compartiment de sédiments du fond est constitué de solides et d'eau interstitielle. L'entrée et la sortie des produits chimiques se font par diffusion, dépôt et resuspension.

La concentration dans la biomasse terrestre est le résultat du produit de la concentration dans le sol et du coefficient de répartition plantes-sol; c'est-à-dire qu'on suppose qu'une expression d'équilibre incorpore la production de végétation ou le taux de croissance. La biomasse animale n'est pas prise en considération dans le bilan massique, mais elle est traitée comme un vecteur d'exposition.

Les processus de transformation abiotique et biotique sont tous deux inclus sous la forme de constantes de vitesse de premier ordre. Si aucune constante de vitesse n'est disponible, on fixe la valeur de ce paramètre à zéro afin de représenter une estimation raisonnable.

Il est possible de modifier les dimensions et les caractéristiques de l'environnement pour représenter d'autres régions. Les voies d'exposition des humains considérées sont l'inhalation d'air, l'ingestion de fruits, de légumes et de céréales; l'ingestion de viande, de lait et de produits laitiers; l'ingestion de poisson; l'ingestion de terre; et l'absorption par voie cutanée.

On inclut les hypothèses suivantes pour l'évaluation de l'exposition humaine :

i) Pour l'exposition par inhalation, on considère les phases gazeuses et particulées des produits chimiques. Pour la phase vapeur, on suppose que l'exposition a lieu durant toute l'année. On considère que l'exposition à la phase particulée n'a lieu que lorsque le sol n'est pas recouvert d'eau de pluie stationnaire ou de neige.

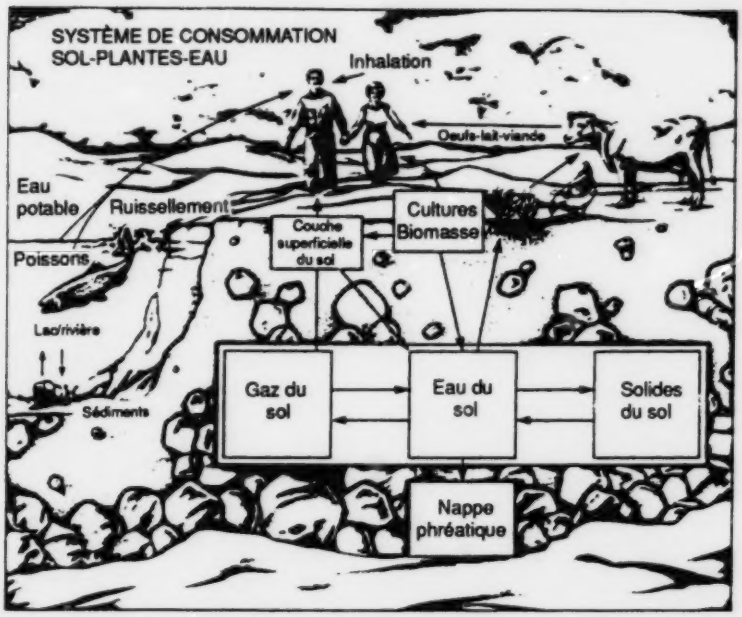


Figure A.1
Schéma conceptuel des principaux compartiments, phases et voies considérés dans la méthodologie de sélection.

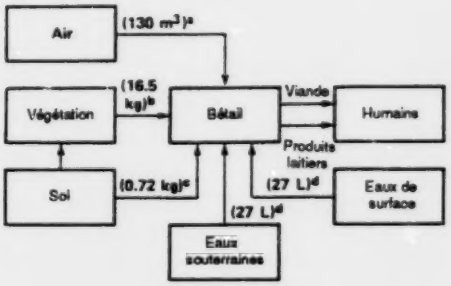


Figure A.2
Schéma du modèle de la voie bétail / viande / produits laitiers.
Toutes les valeurs sont des apports journaliers. [a]Anspaugh et collab. (1971). [b]Absorption de masse sèche de végétaux (Rosenblatt et collab., 1983). [c]Ingestion de sol par le bétail (Small, 1984). Cette valeur est probablement un peu trop élevée. Selon Smith (1977), l'estimation raisonnable de l'ingestion de sol se situe entre 0,25 et 0,5 kg / jour. [d]La consommation totale d'eau est de 55 litres / jours (USNRC, 1977). Nous supposons que cet apport se répartit également entre les eaux de surface et les eaux souterraines.

ii) On suppose que l'eau potable provient aussi bien des eaux superficielles que des eaux souterraines.

iii) On suppose que la végétation provient principalement des cultures (c'est-à-dire fruits, légumes et céréales) produites dans les régions voisines.

iv) La contamination du bétail par l'inhalation d'air et l'ingestion d'eau, de végétation et de terre est calculée au moyen d'un coefficient de partition par rapport aux graisses animales. La figure A.2 est une illustration des voies d'exposition bétail/viande/produits laitiers/homme.

v) La consommation de poisson est traitée par un facteur standard de bioconcentration dans le poisson.

vi) On a inclus un terme pour l'ingestion de terre par l'homme, lequel varie en fonction de l'âge.

vii) On considère que la sorption cutanée est uniquement le résultat du contact avec le sol. Ce processus n'est pas quantifié pour les activités de natation ou les bains.

viii) L'exposition est modifiée en fonction du groupe d'âge.

Le calcul du débit de dose moyen s'obtient en faisant la moyenne de l'intégrale de temps de l'apport journalier par toutes les voies. Un terme est inclus pour représenter la fraction de l'année pendant laquelle a lieu l'exposition. On a également inclus un facteur d'absorption, bien que ce facteur ne soit pas bien quantifié.

On estime les risques relatifs des produits chimiques en comparant les débits de dose estimés aux doses essentiellement sans danger (DESD). Le tableau A.1 illustre la distribution dans l'environnement et l'exposition en résultant pour des rejets unitaires de produits chimiques. Le modèle évalue également les risques relatifs. Cette méthode est principalement utile en tant qu'outil de sélection. Néanmoins, ce modèle pourrait être adapté à d'autres régions spécifiques.

Données requises

Propriétés physico-chimiques : solubilité, tension de vapeur, K_{ow}. Constantes de vitesse de dégradation. Données relatives à l'émission. Caractéristiques de l'environnement, notamment fraction de la surface des terres recouverte d'eau et profondeur d'eau moyenne.

Résultats

Les résultats produits sont les teneurs dans l'environnement, l'apport par les différentes voies d'exposition et l'apport total. On peut calculer les risques relatifs pour la santé pour un grand nombre de produits chimiques.

Applications

GEOTOX a été appliqué à l'évaluation des risques relatifs pour la santé de trois produits chimiques : 2,4,6-trinitrotoluène, hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine et benzène. On a recours à une «analyse d'exposition unitaire», laquelle suppose une entrée unitaire continue dans la couche supérieure du sol. Les expositions en résultant sont comparées aux DESD et classées selon leur valeur par rapport à ce débit de dose, comme le montrent les tableaux A.1 et A.2

Ordinateur

Disponible sur 5 disquettes pour disque dur IBM.

Disponibilité

On peut se procurer les disquettes sans frais auprès du laboratoire Lawrence Livermore. Il faut signer un accord de licence ce concernant la reproduction des disquettes.

Commentaires

Il s'agit d'un des modèles existants les plus perfectionnés. Il contient pratiquement toutes les composantes essentielles à l'analyse complète de l'exposition. L'auteur reconnaît la faiblesse des expressions de l'absorption par les plantes. Le groupe travaille toujours activement dans ce domaine, et on s'attend à la production de nouvelles versions dans un proche avenir.

Tableau A.1
Doses quotidiennes prédites pour les sept voies d'exposition après le rejet de 1 mol/km^2-an de chaque contaminant dans le compartiment supérieur du sol.

	Dose absorbée (mg/jg.jour)		
Voie	Benzène	RDX	TNT
Inhalation	3×10^{-7}	2×10^{-11}	2×10^{-8}
Consommation d'eau	5×10^{-10}	1×10^{-5}	1×10^{-5}
Ingestion de fruits et de légumes	4×10^{-10}	4×10^{-5}	1×10^{-5}
Ingestion de viande et de produits laitiers	2×10^{-10}	6×10^{-8}	7×10^{-8}
Ingestion de poissons	6×10^{-10}	7×10^{-8}	6×10^{-8}
Ingestion de sol	3×10^{-14}	5×10^{-11}	4×10^{-10}
Absorption cutanée	2×10^{-14}	3×10^{-12}	2×10^{-10}
Total	3×10^{-7}	5×10^{-5}	2×10^{-5}

Tableau A.2
Comparaison des débits de dose de contaminants estimés pour toutes les voies d'exposition et des doses virtuellement sans danger (DVSD).

Contaminant	Débit de dose (mg/kg-jour) A	DVSD (mg/kg-jour) B	Rapport de sélection A/B	Rang
Benzène	3×10^{-7}	4×10^{-5} [a]	$7{,}5 \times 10^{-3}$	2
TNT	2×10^{-5}	1×10^{-3} [b]	2×10^{-2}	1
RDX	5×10^{-5}	1×10^{-2} [c]	5×10^{-3}	3

[a] Basé sur un risque de leucémie à vie de 10^{-6} (d'après Layton et col., 1981).
[b] Calculé à partir d'une valeur normale dans l'eau potable de 0,05 mg/litre (Conseil national de recherches, 1982).
[c] Calculé d'après un niveau sans effet chronique observé de 1 mg/kg-jour chez les animaux de laboratoire (Conseil national de recherches, 1982) et un facteur de sécurité de 100.

Modèle B

Nom :

RAPS – Remedial Action Priority System.

Type de modèle :

Modèle pour l'étude de l'exposition multimédia dans des sites d'enfouissement de déchets dangereux.

Référence :

Whelan, G., Strange, D.L., Droppo, J.G., Jr., Steelman, B.L., Buck, J.W. «The remedial action priority system (RAPS): mathematical formulations», prepared for the U.S. Department of Energy, Office of Environment, Safety and Health, 1987.

Personne-ressource :

Dr James G. Droppo, Jr., Pacific Northwest Laboratories, P.O. Box 999, Richland, WA 99352, USA, Téléphone : (509) 376-7652.

Description

Le système RAPS a été élaboré à l'intention du Department of Energy des États-Unis pour la classification des dangers représentés par les sites d'enfouissement de déchets chimiques et radioactifs. On l'utilise principalement comme outil pour la détermination des priorités en ce qui concerne l'étude des sites et d'éventuelles mesures de décontamination. Ce modèle est destiné à des fins de comparaison plutôt qu'à des prévisions. La méthodologie considère quatre voies principales de migration des contaminants : eaux souterraines, eaux de surface, sol et atmosphère. Les teneurs qu'il permet d'estimer dans l'air, le sol, les sédiments et l'eau servent à évaluer l'exposition des populations vivant à proximité.

L'évaluation détaillée de l'exposition considère celle-ci par les voies suivantes : inhalation des polluants atmosphériques, ingestion d'eau potable, de poissons et crustacés, de végétation et de produits animaux contaminés; doses externes émises par radiations; et contact externe cutané avec les produits chimiques. L'exposition totale par toutes les voies est estimée et est combinée avec les données toxicologiques pour le calcul d'un indice de danger potentiel (IDP).

La méthodologie multimédia «pseudo-composite» ne calcule que des modules indépendants, lesquels n'ont d'interaction ni dans l'espace ni dans le temps. Cette conception modulaire permet de mettre à jour ou d'inclure des éléments additionnels au fur et à mesure des progrès de la technologie.

Le modèle RAPS emploie les données fournies par l'utilisateur sur les caractéristiques du site et des agents polluants pour simuler la migration et le devenir, de la source au récepteur par différentes voies. L'utilisateur doit identifier les voies appropriées empruntées par les produits chimiques, du site d'enfouissement des déchets aux populations voisines, à travers différents milieux. L'exposition est calculée en termes de dose à vie. Lorsque l'exposition a été évaluée, un IDP est calculé pour le site. Les quatre voies environnementales et les voies d'exposition en résultant sont illustrées à la figure B.1, les rectangles ombrés représentant un exemple de voies de transport et d'exposition.

Les contaminants éliminés par lessivage du sol, des sites d'enfouissement ou des étangs migrent à travers une zone d'eau souterraine partiellement ou totalement saturée. On suppose que le mouvement dans la zone partiellement saturée est vertical, tandis que le mouvement dans la zone saturée se fait dans la direction de l'écoulement des eaux souterraines. Le module des eaux souterraines calcule les concentrations dans les puits et les rives des cours d'eau voisins ainsi que le flux vers les eaux de surface. Le couplage potentiel des eaux souterraines et d'autres modules est illustré à la figure B.2.

Les masses d'eau de surface peuvent inclure d'une manière générale les cours d'eau non soumis aux marées, les estuaires, les lacs, les côtes et les lacs artificiels. Toutefois, à ce stade de développement, le modèle RAPS inclut seulement les cours d'eau non soumis aux marées. Au besoin, on peut ajouter d'autres masses d'eau comme modules indépendants. Compte tenu du fait que le temps de séjour des rejets de courte durée des produits chimiques peut être plus court que le temps de répartition dans les eaux de surface, on ne considère que les émissions continues en conditions constantes.

Le module des eaux de surface considère le transport par advection et par dispersion. Les interactions avec les autres modules sont illustrées à la figure B.2.

Le ruissellement, résultant principalement des précipitations, est la fraction constituée par les eaux s'écoulant à la surface du sol. L'estimation du flux des contaminants est basée sur les informations concernant le type de sol et la couverture du sol, l'utilisation et le traitement des sols, les conditions hydrologiques, l'emplacement, ainsi que la teneur en eau du sol. Il est possible d'estimer le ruissellement direct causé par les orages. L'érosion du sol est considérée pour différentes conditions de géographie et de végétation. L'exposition par cette voie est décrite à la figure B.2.

Le modèle RAPS considère les mécanismes et les caractéristiques de rejet, la dilution et le transport, le lavage et les précipitations, ainsi que les dépôts secs par voie atmosphérique. La dégradation n'est pas considérée, car on suppose que le transport des contaminants est rapide. On obtient donc une estimation prudente.

Les voies d'exposition des humains sont illustrées à la figure B.3.

La voie d'exposition par inhalation inclut l'inhalation de l'air ambiant aussi bien que celle des vapeurs contaminées lorsqu'on prend une douche. Les populations vivant à moins de 80 km du site sont potentiellement exposées à la voie atmosphérique. L'exposition à l'air contaminé est calculée à partir du taux de respiration et de la teneur moyenne dans l'air. On considère que la voie d'exposition par la douche ne concerne que les eaux souterraines, car les composés volatiles ont par hypothèse une demi-vie courte dans les eaux de surface ou de ruissellement.

Figure B.1
Schéma simplifié illustrant les interactions entre les voies de transport et les éléments de l'évaluation de l'exposition de la méthodologie RAPS. (Les rectangles ombrés indiquent un chemin possible de transport et d'exposition à un contaminant selon la méthodologie RAPS) (d'après Whelan et collab. 1986).

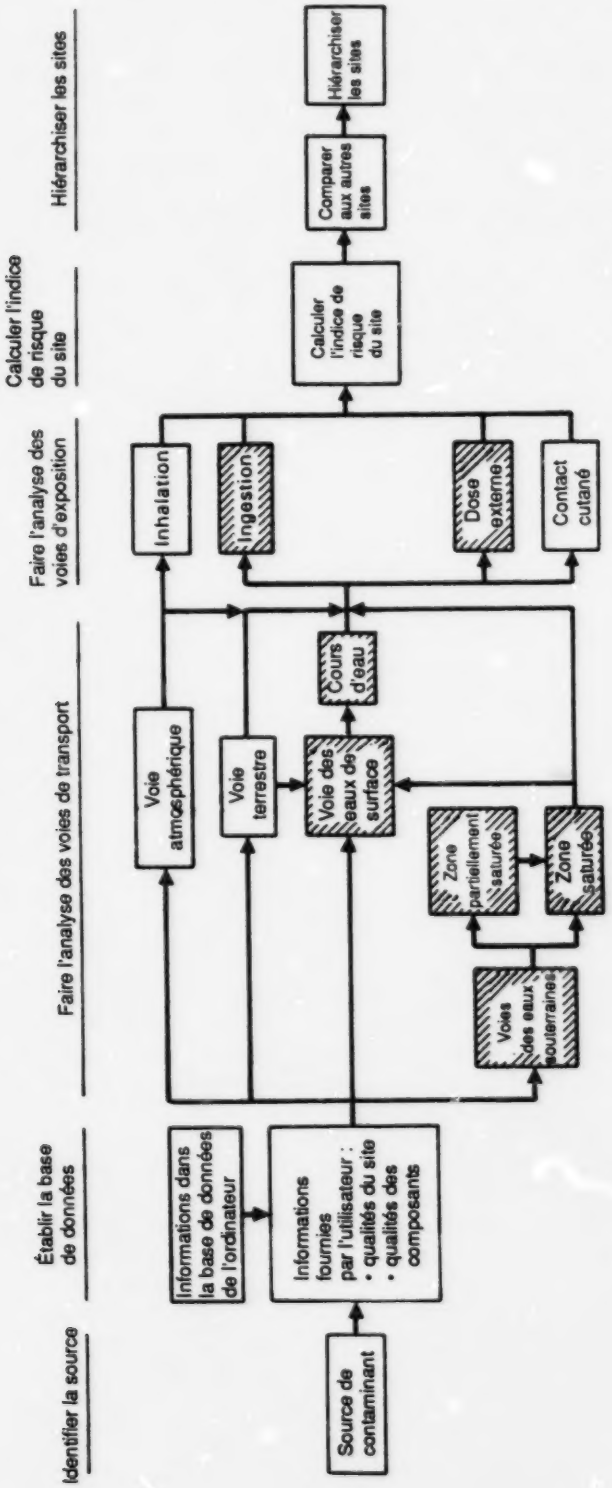


Figure B.2
Voies d'exposition considérées dans le modèle RAPS (d'après Bolten et collab., 1983; Whelan et collab., 1987).

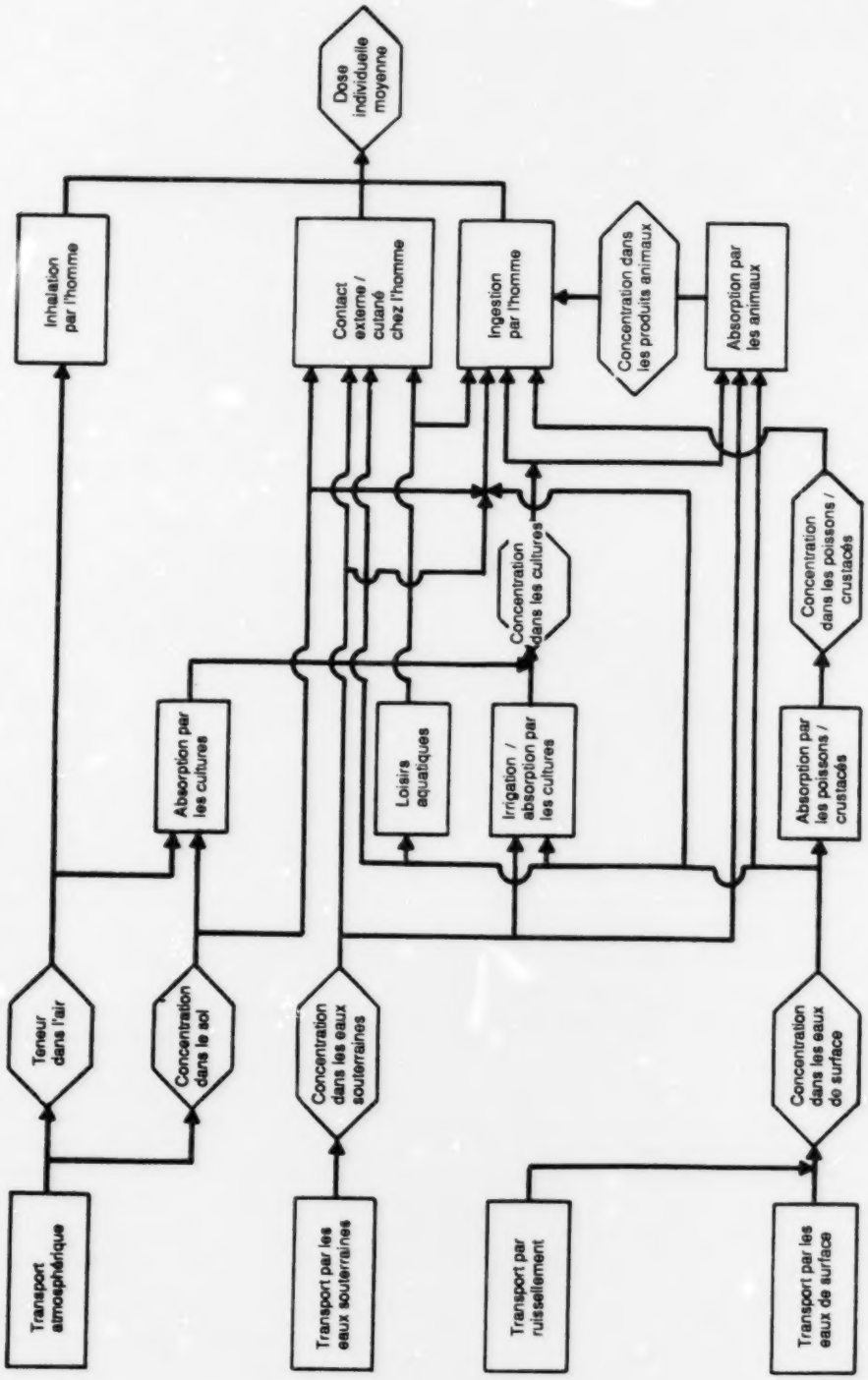
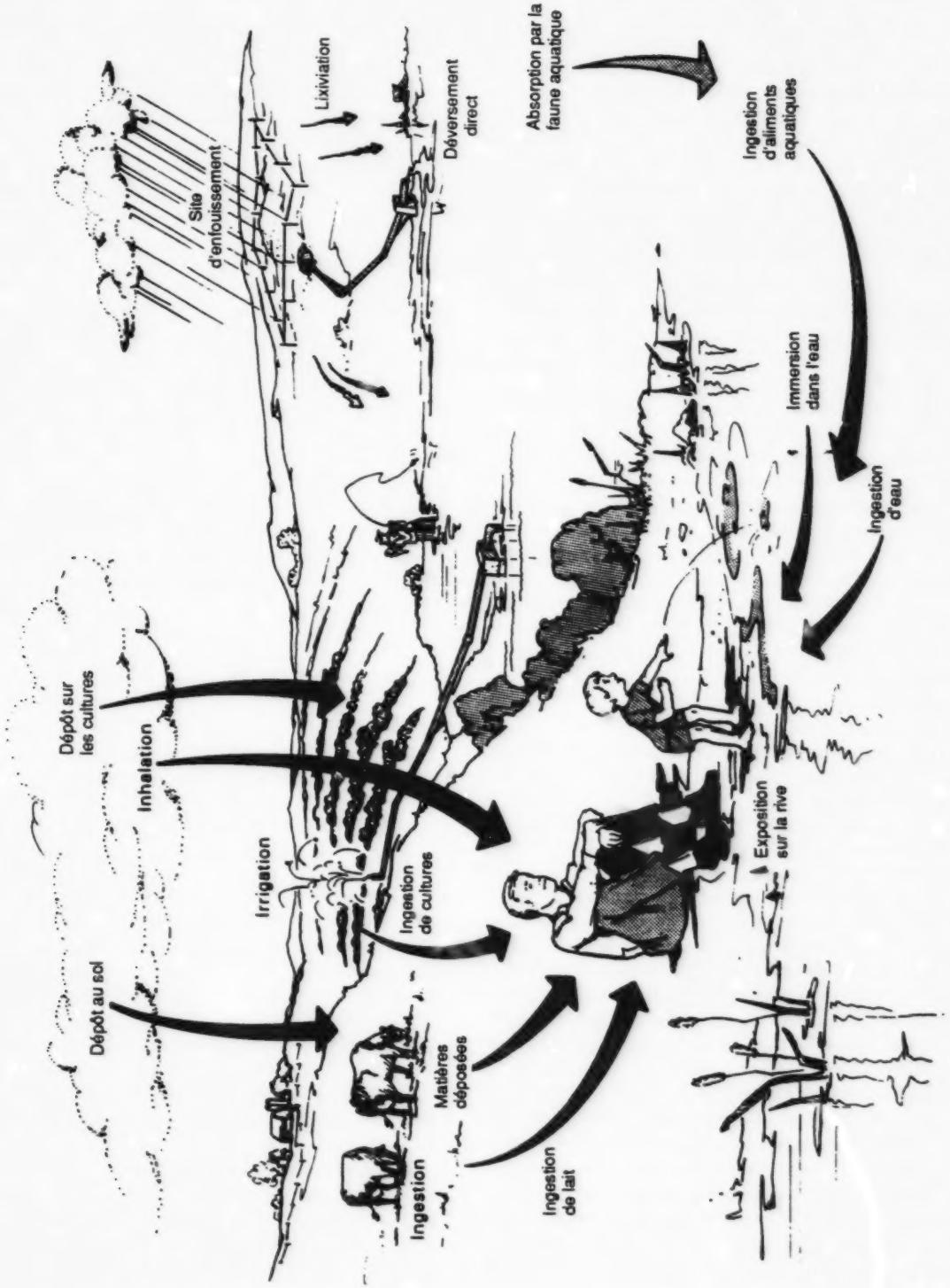

Dose individuelle moyenne
Inhalation par l'homme
Contact externe / cutané chez l'homme
Ingestion par l'homme
Concentration dans les produits animaux
Absorption par les animaux
Concentration dans les cultures
Concentration dans les poissons / crustacés
Absorption par les cultures
Loisirs aquatiques
Irrigation / absorption par les cultures
Absorption par les poissons / crustacés
Teneur dans l'air
Concentration dans le sol
Concentration dans les eaux souterraines
Concentration dans les eaux de surface
Transport atmosphérique
Transport par les eaux souterraines
Transport par ruissellement
Transport par les eaux de surface

Figure B.3
Voies d'exposition de l'homme



Le calcul de l'exposition due à l'ingestion d'eau prend en considération la contamination par les voies des eaux souterraines, des eaux de ruissellement et des eaux de surface. La dose est calculée à partir de la concentration dans l'eau, du taux d'ingestion de l'eau, d'un facteur de traitement de l'eau et un facteur de désintégration, selon le cas, pour la désintégration radioactive ou la dégradation.

En ce qui concerne l'ingestion d'aliments d'origine aquatique, on considère tant les poissons des eaux à écoulement libre que les crustacés vivant dans les sédiments. Cette voie d'exposition est considérée pour les voies de transport par eaux de surface et de ruissellement. La dose est calculée à partir de la concentration dans l'eau et du facteur de bioconcentration.

On considère la contamination des cultures aussi bien par l'irrigation que par le dépôt atmosphérique et l'absorption radiculaire. On classe la végétation en deux catégories, soit les végétaux à feuilles, et les autres. Les végétaux à feuilles incluent la laitue et les autres végétaux ayant une partie comestible au-dessus du niveau du sol. Les autres représentent ceux dont les parties comestibles ne sont pas contaminées de manière importante par le dépôt direct. La concentration dans les plantes due au dépôt direct est calculée en fonction du type de plante, de la vitesse de dépôt, des constantes de vitesse de dégradation et de désintégration possibles, du temps de séjour des particules sur la plante, et d'un facteur de translocation. On calcule la contamination due à l'irrigation à partir de la vitesse d'irrigation et de la concentration dans l'eau. Le transfert sol-plante n'est pas bien quantifié, et est calculé au moyen d'une corrélation par régression avec le coefficient de partage octanol-eau, K_{ow}. Pour calculer la concentration totale dans la plante, on fait la somme de ces processus. Les concentrations dues à la contamination par irrigation et à la contamination atmosphérique sont basées sur un cycle agricole d'une année. Pour tenir compte de la contribution de l'absorption par le sol, on apporte une correction pour l'accumulation d'une année à l'autre dans le sol. L'exposition est estimée à partir de la concentration et des taux moyens de consommation pour les deux types de végétaux.

On suppose que l'ingestion des produits chimiques par les animaux domestiques est le résultat de l'ingestion d'aliments contaminés, de l'utilisation d'eau contaminée pour irriguer les cultures, et d'eau potable contaminée. La concentration dans les aliments est la concentration dans les végétaux modifiée pour tenir compte d'une période de pousse plus courte reflétant les habitudes d'alimentation. Les coefficients de transfert à la viande et au lait sont calculés à partir des corrélations disponibles avec K_{ow}. Tout comme pour les corrélations du transfert sol-végétaux, ils ne fournissent que des estimations approximatives.

On estime également l'ingestion accidentelle de terre et d'eau. On ne considère pas l'absorption cutanée, car on suppose qu'il s'agit d'un cas mineur en comparaison avec l'estimation prudente de l'ingestion accidentelle de terre et d'eau.

L'exposition externe aux radiations des produits chimiques due aux activités de loisirs aquatiques est estimée, de même que l'exposition aux sols contaminés ou aux sédiments du littoral due aux activités terrestres telles que la marche ou la pêche sur les rives. L'estimation de l'exposition inclut la prise en considération des concentrations dans le sol et dans l'eau, du temps passé à exercer l'activité, des facteurs de dose d'immersion dans l'eau, et de la concentration des sédiments contaminés déposés sur la rive.

L'exposition totale par toutes les voies est estimée et est combinée aux données toxicologiques. Un facteur de risque individuel est compilé pour les radionucléides, ainsi que pour les produits chimiques cancérigènes et non cancérigènes. Ces facteurs de risque sont combinés aux populations exposées et à un facteur de temps afin de déterminer le IDP. Les sites sont alors classés par ordre croissant de IDP. Le recours à des informations spécifiques à chaque site diminue le risque de subjectivité.

Données requises

Les données requises incluent les informations détaillées spécifiques à chaque site sur les caractéristiques hydrologiques et pédologiques, les conditions climatiques et météorologiques, ainsi que les caractéristiques des contaminants. Les données introduites doivent inclure l'identification des voies d'exposition possibles.

Résultats

Les résultats produits sont les teneurs dans l'environnement et le potentiel d'exposition par les différentes voies.

L'exposition à vie des populations voisines due à toutes les voies considérées est calculée, et un IDP est compilé pour le site en question.

Applications

Les applications n'ont été publiées que pour des cas hypothétiques, notamment l'arsenic et le strontium 90.

Ordinateur

Ordinateur central.

Disponibilité

Inconnue, mais les principles expressions ont été publiés.

Commentaires

Ce modèle ne peut pas être utilisé directement pour l'évaluation de l'exposition des humains aux produits chimiques d'usage commercial général. Il est principalement destiné à la classification des sites d'enfouissement pour fins de décontamination en vertu de la législation américaine Superfund. Sa force et son utilité résident dans les efforts considérables qui ont été consacrés à la détermination d'expressions raisonnables pour quantifier le transfert et l'exposition. Celles-ci pourraient être exploitées avec profit dans le développement de nouveaux modèles; en d'autres termes, on pourrait adapter des modules selon les besoins.

Une version améliorée du modèle RAPS a été élaborée récemment par Battelle pour le Department of Energy des États-Unis. On trouvera en annexe de la présente section un résumé de ce système d'évaluation multimédia des agents polluants dans l'environnement, ou MEPAS.

MEPAS : Une nouvelle approche pour la gestion des problèmes environnementaux

À mesure que notre compréhension des effets de l'industrialisation sur la santé du public et l'environnement s'est accrue, le nombre de problèmes environnementaux identifiés a augmenté de manière spectaculaire. Il devient nécessaire de disposer de méthodes d'évaluation reposant sur une base scientifique, afin d'aider au développement de stratégies de gestion de l'environnement et de s'attaquer à cette liste croissante de problèmes. Par exemple, on peut utiliser les méthodologies d'évaluation des niveaux potentiels d'exposition aux contaminants et des risques pour la santé et pour l'environnement qui en découlent pour classifier ces problèmes de manière relative.

Auparavant, l'évaluation des contaminants s'intéressait généralement à une seule voie environnementale, par exemple les eaux souterraines, les eaux de surface ou l'atmosphère. Cependant, en réalité, les contaminants libérés dans un milieu finissent par migrer dans plusieurs autres milieux et par interagir avec ces derniers. Par exemple, les contaminants atmosphériques provenant d'une cheminée sont déposés à la surface du sol environnant, puis sont transportés par le ruissellement de surface engendré par les précipitations jusqu'aux eaux de surface, puis finalement aux eaux souterraines par lessivage dans le sol. Par conséquent, si l'on veut décrire de manière plus précise les complexités des interactions entre les contaminants et l'environnement, les méthodologies scientifiques d'évaluation doivent considérer l'intégration du transport à travers les différents milieux et du devenir des contaminants.

Lorsque les problèmes environnementaux potentiels ont été identifiés, il convient de les classer afin de pouvoir traiter en premier lieu ceux qui ont les impacts globaux potentiels les plus importants. Le temps d'arrivée des contaminants et la durée de l'exposition sont des considérations importantes pour l'évaluation des effets potentiels sur la santé du public et sur l'environnement. Afin de traiter ces questions de manière adéquate, il est nécessaire d'avoir recours à une méthodologie de classification reposant sur une base scientifique, et ce dès le début de l'étude. Cette méthodologie doit mettre l'accent sur les ressources humaines et financières disponibles pour des études ultérieures et la correction éventuelle des problèmes à haut risque.

Classification des priorités en fonction du risque à l'aide du modèle MEPAS

Le U.S. Department of Energy (DOE), Office of Environment, Safety and Health, effectue une étude environnementale de l'ensemble du complexe du DOE afin d'identifier et d'attribuer les priorités aux problèmes environnementaux potentiels. Il était nécessaire de disposer d'une méthode puissante et reposant sur des bases scientifiques afin de définir les priorités des problèmes environnementaux du DOE et d'assurer une planification à long terme efficace des mesures correctrices. La méthodologie devait également être assez souple pour tenir compte d'une large gamme de scénarios de milieux et de contaminants. Le DOE s'est adressé à des chercheurs du Pacific Northwest Laboratory (PNL), lesquels ont développé le Multimedia Environmental Pollutant Assessment System (MEPAS).

Le système MEPAS constitue une amélioration du modèle Remedial Action Priority System (RAPS), lequel a également été développé par ce laboratoire pour le compte du DOE. Le système MEPAS permet de classifier les problèmes environnementaux en fonction du risque qu'ils présentent pour la santé. Il s'agit d'un système d'évaluation environnemental multimédia objectif, s'appuyant sur des principes physiques et qui est totalement intégré. Le MEPAS est un système informatisé qui utilise des équations mathématiques ayant des bases empiriques, analytiques et semi-analytiques. La méthodologie du MEPAS s'appuie sur des modèles informatiques généralement reconnus et ayant fait l'objet d'examens indépendants par des experts. L'analyse des voies simule le rejet potentiel des contaminants dans l'environnement, transporte les contaminants dans et entre plusieurs milieux, expose les populations environnantes à ces contaminants, et calcule les effets sur la santé (c'est-à-dire le risque) associés à l'exposition.

À la différence de modèles d'évaluation plus complexes, le MEPAS utilise les données immédiatement disponibles dès les premiers stades de l'étude du problème. Le MEPAS peut être utilisé avec les données sur les contaminants fournies par les inspections de sites effectuées en vertu du Comprehensive Environmental Response, Compensation and Liability Act. Les données relatives au cadre environnemental du problème peuvent être fournies soit par des dossiers spécifiques au site, soit par des publications et des dossiers provenant d'organismes au niveau fédéral, de l'État ou de la localité.

Le système MEPAS résout nombre de contraintes caractéristiques associées au méthodologies de sélection et, par conséquent, fait office de lien entre le processus de sélection du problème environnemental et les travaux de caractérisation du site et d'évaluation quantitative, plus exigeants du point de vue des ressources. Le système MEPAS permet aux investigateurs de :

- traiter tant les déchets chimiques que les déchets radioactifs
- utiliser les informations spécifiques au site pour effectuer une évaluation plus précise
- définir le problème, introduire les données et utiliser le système MEPAS par l'intermédiaire d'une interface conviviale
- prendre en considération les caractéristiques du contaminant associées au transport par les différentes voies, notamment les facteurs tels que le temps de rétention et d'arrivée aux récepteurs sensibles
- calculer les différentes voies d'exposition, incluant l'inhalation, l'ingestion, le contact cutané et les doses externes, tout en tenant compte de la durée et du niveau de l'exposition par rapport à la taille de la population menacée.

Les problèmes environnementaux n'étant pas nécessairement limités au rejet inactif de longue durée, le système MEPAS est également conçu pour traiter les rejets transitoires (c'est-à-dire par charges discontinues ou peu fréquentes) de

plus courte durée, telles que celles des émissions atmosphériques de cheminées ou des dépôts sur les masses d'eau de surface. Ces caractéristiques additionnelles permettent au système de produire une évaluation des problèmes environnementaux qui croisent les lignes réglementaires?, fournissant ainsi une base commune et objective pour l'attribution des priorités dans un large éventail de situations environnementales.

Interface conviviale

Dans le cas de la plupart des modèles informatiques, l'introduction et la vérification des données requises pour un scénario donné de transport et d'exposition constitue un travail long et fastidieux. Par conséquent, les chercheurs du Pacific Northwest Laboratory ont conçu une interface pour l'utilisateur du MEPAS qui facilite l'introduction des données, le contrôle de la qualité des données introduites, et l'exécution séquentielle des modèles du MEPAS.

Pour adapter le MEPAS à un site donné, l'investigateur désigne les voies de transport appropriées en identifiant le trajet emprunté à travers les différents milieux par les éléments du site d'enfouissement des déchets. Le système demande alors à l'utilisateur de fournir les informations relatives au site et aux éléments constitutifs. Les voies d'exposition de la population sont intégrées dans l'analyse, et le risque subséquent pour la population est calculé pour le site en question.

L'interface conviviale facilite l'accès et la manipulation des données et des fichiers du site pour l'évaluation de sites d'enfouissement de déchets dangereux. Le MEPAS fonctionne sur un IBM-PC (ou autre ordinateur compatible à 100 p. 100) avec 640 K de mémoire vive et un disque dur de 20 Mo. Il utilise une imprimante à 132 colonnes. Il n'est pas nécessaire d'avoir un co-processeur mathématique, mais celui-ci améliore grandement les performances. Les programmes de saisie des données et de stockage en mémoire sont écrits en dBase III Plus compilé. Le modèle MEPAS est en FORTRAN, et les programmes intermédiaires sont en C. L'installation demande un espace disque d'environ 1 Mo. Il s'agit d'une application basée sur des fichiers; toutes les données sont stockées et échangées entre les principaux éléments par entrée/sortie de fichiers.

L'interface conviviale offre un menu dont les options permettent d'accéder aux éléments suivants :

- Création/mise à jour/examen – L'investigateur définit un problème environnemental potentiel et introduit les données requises pour l'exploitation du modèle. Cette définition est utilisée pour créer des feuilles de travail spécifiques au problème spécifiant les termes source et les données relatives aux voies de transport et d'exposition. Les problèmes et les données qui ont déjà été introduits peuvent servir à créer de nouveaux cas.
- Exécution/impression/grilles de données – L'investigateur utilise le modèle MEPAS pour le problème environnemental défini à l'étape précédente. Cette option permet d'imprimer la documentation relative aux entrées et aux sorties.
- - Bibliothèque des éléments – Un module de recherche rapide permet à l'investigateur de consulter rapidement les propriétés physiques et chimiques des radionucléides et des produits chimiques utilisés dans le modèle MEPAS.

Applications du modèle

Le modèle MEPAS est actuellement utilisé par le DOE pour l'étude environnementale de toutes les installations du DOE à travers les États-Unis. Ces aménagements comprennent 16 installations de production de matériel de défense, ainsi que 20 autres centres d'exploitation majeurs du DOE. Le MEPAS sert à l'évaluation d'environ 500 unités de classement de ces installations. Une unité de classement est un groupe de problèmes environnementaux connexes en un site donné.

Le modèle MEPAS a également été appliqué à 20 sites Superfund de l'Environmental Protection Agency (EPA), dans le cadre de l'effort déployé par cette dernière pour se conformer au Superfund Amendment Reauthorization Act (SARA). Une comparaison du MEPAS avec le système révisé de classification des dangers (HRS) a montré que le MEPAS constituait une technique de classification viable.

Outre la classification des sites, le MEPAS a également été appliqué à plusieurs problèmes concernant un même site, où l'on a obtenu une classification relative des différentes voies d'exposition en un site donné. Cette classification relative a été utilisée pour évaluer les mesures appropriées à prendre à l'égard de ce site.

Quelques mots sur le Pacific Northwest Laboratory

Exploité par le Battelle Memorial Institute, le Pacific Northwest Laboratory est l'un des cinq laboratoires nationaux multidisciplinaires du Department of Energy des États-Unis. Le laboratoire, qui dirige également des programmes de recherche pour d'autres organismes gouvernementaux, s'occupe du développement et du déploiement de la technologie requise pour le support des missions nationales destinées à assurer la compétitivité sur le plan de l'énergie, de la défense et de l'économie.

On peut obtenir des renseignements supplémentaires sur la méthodologie du MEPAS auprès du Pacific Northwest Laboratory. Pour renseignements complémentaires, veuillez vous adresser aux personnes-ressources suivantes :

Dr James G. Droppo, Jr.
(509) 376-7652
John W. Buck
(509) 376-5442

Pacific Northwest Laboratory
P.O. Box 999
Richland, Washington 99352

Modèle C

Nom :

Multi-Phase Non-Steady State Equilibrium Model (MNSEM)

Type de modèle :

Modèle compartimental multimédia

Référence :

i) Yoshida, K., Shigeoka, T., Yamauchi, F. "Estimation of environmental fate of industrial chemicals", Toxicol. Environ. Chem. 17: 69-85, 1988.

ii) Method 507, Draft Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods for Chemicals, OECD Chemicals Group and Management Committee, Hazard Assessment Panel (sous presse 1988).

Personne-ressource :

Kikuo Yoshida, Environmental Science Division, Mitsubishi-Kasei Institute of Toxicological and Environmental Sciences, 1000 Kamoshida-cho, Midori-Ku, Yokohama 227, Japon, Téléphone : 045-963-3543

Description

MNSEM est un modèle cinétique conçu pour la prédiction du devenir dans l'environnement des produits chimiques organiques dans des conditions constantes de rejet continu dans l'environnement. Le modèle calcule la répartition, la persistance et les concentrations des produits chimiques dans un environnement évaluatif ou hypothétique constitué de rapports volumiques «raisonnables» des milieux environnementaux. Il estime également le temps de rétablissement après la fin des émissions.

L'environnement du modèle, représentatif du Japon, est constitué de quatre compartiments principaux : air, eau, sol et sédiments; les sous-compartiments sont les suivants : air et gouttes de pluie dans l'air, biote et solides suspendus dans l'eau, air, eau et solides dans le sol; et solides contenant de l'eau interstitielle dans les sédiments. Comme dans les modèles basés sur la fugacité, chaque phase est bien mélangée et on suppose que l'équilibre règne à l'intérieur des compartiments, mais pas entre deux compartiments différents. L'ensemble d'équations différentielles du bilan massique inclut les expressions des transferts interphase diffusif et non diffusif ainsi que celles des processus de dégradation. Le partage intraphase est décrit par les constantes d'équilibre, notamment le coefficient de partage du carbone organique, K_{oc}, les facteurs de bioconcentration (FBC) et la constante de la loi de Henry, H.

Le transfert diffusif interphase entre l'air et le sol, l'air et l'eau, et les sédiments et l'eau est quantifié au moyen de coefficients de transfert de masse. Les processus de transfert non diffusif sous l'action des précipitations, du ruissellement, du dépôt de sédiments en suspension et de lessivage du sol sont caractérisés par des constantes de vitesse. Les processus de dégradation incluent l'oxydation des radicaux hydroxyle, la photolyse, l'hydrolyse et la biodégradation.

Ces processus sont illustrés à la figure C.1.

Le modèle estime les concentrations dans des conditions constantes dans chaque phase ainsi que le temps d'élimination dans l'environnement.

Le MNSEM n'est pas dépendant du site, et la dépendance par rapport à la température des propriétés physiques des produits chimiques n'est pas considérée.

Données requises

Les données d'entrée requises incluent la solubilité, la tension de vapeur, le coefficient de sorption par le carbone organique (K_{oc}) et le facteur de bioconcentration (FBC). Il n'y a pas de calcul par défaut de K_{oc} et de FBC. Il est également nécessaire de fournir les données relatives aux constantes de vitesse de transformation et aux taux de charge des produits chimiques. Les taux de charge sont estimés en fonction de la production annuelle au Japon, des types d'utilisation et des propriétés physico-chimiques. Cet algorithme n'est pas inclus dans le modèle.

Applications

Le modèle a été appliqué à l'étude du devenir du chloroforme, de l'aniline, du chlorobenzène, du nitrobenzène et du naphtalène au Japon. Les concentrations estimées diffèrent en général d'un ordre de grandeur des données disponibles. On trouvera au tableau C.1 un résumé des l'estimation du devenir du naphtalène dans l'environnement.

Ordinateur

Le programme est écrit en Microsoft MS-DOS BASIC et est disponible sur disquette.

Disponibilité

Communiquer avec le Dr Yoshida.

Commentaires

Ce modèle présente un intérêt praticulier, car sa raison d'être est similaire à celle de la LCPE au Canada. Il traite l'ensemble d'un pays. Il est très encourageant de voir que le modèle a été mis en application avec succès au Japon. Les concentrations estimées sont à moins d'un ordre de grandeur des concentrations observées, ce qui est probablement satisfaisant, étant donné la variabilité dans l'espace des concentrations influencées par la proximité de zones urbaines ou industrielles.

Figure C.1
Schéma du devenir dans l'environnement

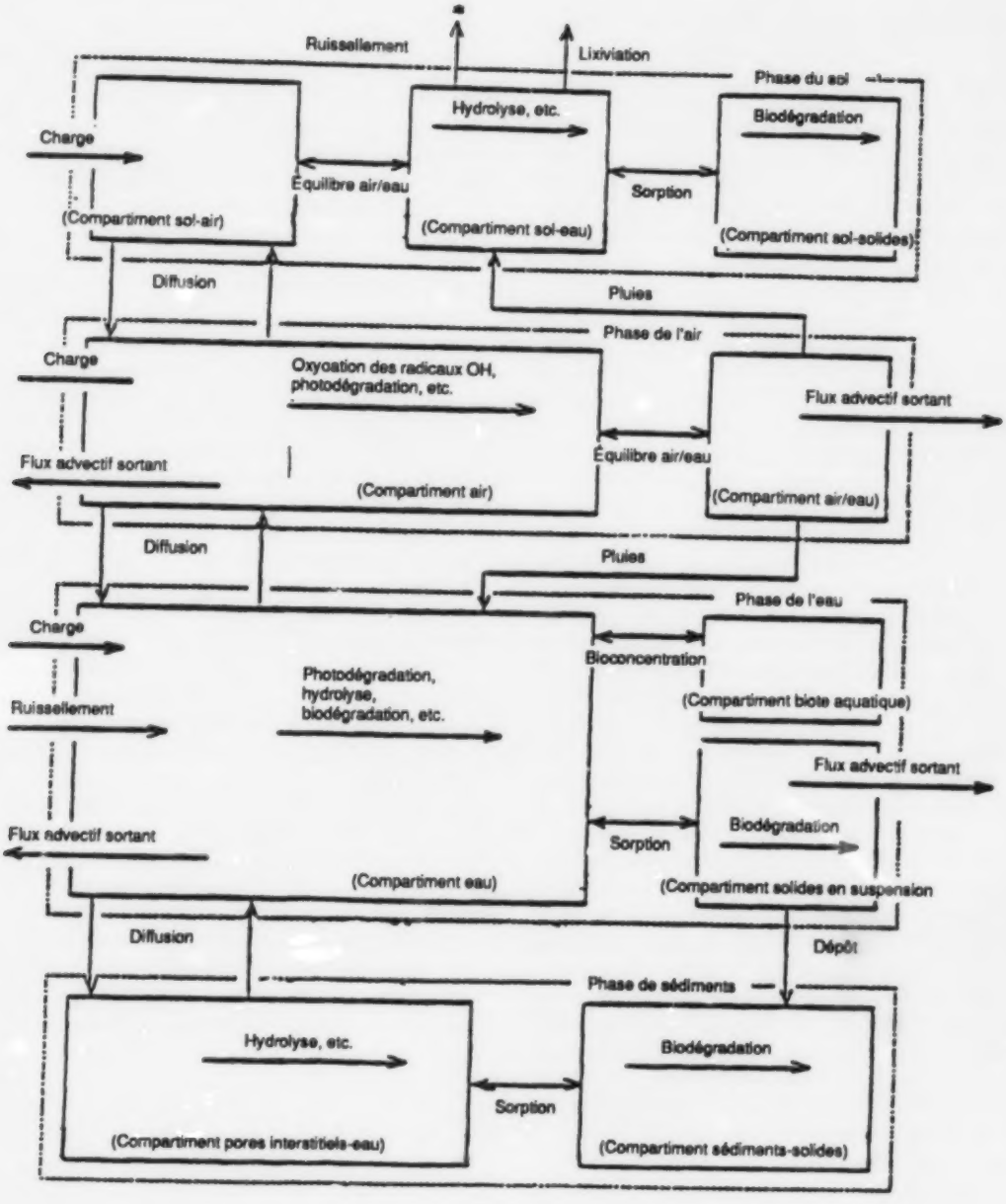


Table C.1
Résumé du devenir dans l'environnement du naphtalène, évalué à l'aide du modèle multiphases à l'équilibre dans des conditions constantes.

1. Distribution massique par fraction

Phase air
- Compartiment air : 99,83 %
- Compartiment air-eau : 0,17 %

Phase eau
- Compartiment eau : 99,94 %
- Compartiment solides en suspension : 0,05 %
- Compartiment biote aquatique : 0,01 %

Phase sol
- Compartiment air : 0,01 %
- Compartiment eau : 0,92 %
- Compartiment solides du sol : 99,07 %

Phase sédiments
- Compartiment eau : 1,37 %
- Compartiment solides des sédiments : 98,63 %

2. Temps de séjour moyen

Phase air

Temps de séjour moyen : 0,783 jour

Processus	Constante de vitesse (1/jour)	Contribution à l'élimination (%)
• flux advectif sortant	: 2,40E-01	18,79
• transformation	: 1,02E+00	79,73
• diffusion dans l'eau	: 1,82E-02	1,42
• diffusion dans le sol	: 5,88E-04	0,05
• pluie	: 1,00E-01	0,01

Phase eau

Temps de séjour moyen : 6,756 jours

Processus	Constante de vitesse (1/jour	Contribution à l'élimination (%)
• flux advectif sortant	: 9,60E-03	6,48
• transformation	: 1,89E-02	12,77
• diffusion dans l'air	: 5,96E-02	40,24
• diffusion dans les sédiments	: 6,00E-02	40,48
• solidification dans les sédiments	: 1,00E-01	0,04

Phase sol

Temps de séjour moyen : 37,090 jours

Processus	Constante de vitesse (1/jour)	Contribution à l'élimination (%)
• transformation (compartiment eau) (compartiment solides du sol)	: : 9,10E-04) : 9,10E-03)	33,47
• diffusion dans l'air	: 1,57E+02	61,09
• écoulement vers l'eau	: 8,00E-02	2,72
• lessivage	: 8,00E-02	2,72

Phase sédiments

Temps de séjour moyen : 2,674 jours

Processus	Constante de vitesse (1/jour)	Contribution à l'élimination (%)
• transformation (compartiment eau) (compartiment sédiments)	: : 9,10E-04 : 9,10E-03	2,40
• diffusion dans l'eau	: 2,66E+01	97,60

3. Taux de charge dans l'environnement g/jour

Air	: 29,00
Eau	: 45,00
Sol	0,00

4. Solution dans des conditions constantes

Phase	Masse	Concentration
Air	: 4,66E+01	2,33E-08 mg/L 4,44E-06 ppm
Eau	: 5,12E+02	7,32E-05 mg/L
Sol	: 1,10E+00	3,68E-05 mg/L
Sédiments	: 8,22E+01	3,91E-03 mg/L

5. Temps d'élimination dans l'environnement

Temps d'élimination : 3,10E+01 jours

Modèle D

Nom :
Persistance

Type de modèle :
Modèle aquatique.

Référence :

i) Conseil national de recherche du Canada (CNRC). A screen for the relative persistence of lipophilic organic chemicals in aquatic ecosystems. An analysis of the role of a simple computer model in screening. Report of the NRCC's Associate Committee on Scientific Criteria for Environmental Quality. NRCC 18570, 1981.

ii) Asher, S.C., Lloyd, K.M., Mackay, D., Paterson, S., Roberts, J.R. A critical examination of environmental modelling – modelling the fate of chlorobenzenes using the persistence and fugacity models. NRCC's Associate Committee on Scientific Criteria for Environmental Quality. NRCC 23990.

Personne-ressource :

Le groupe responsable du développement au CNRC est maintenant dissout. L'auteur principal, J.R. Roberts, travaille à présent dans un autre ministère. On peut communiquer avec K. Lloyd au Service canadien de la faune.

Description

Le modèle basé sur la persistance a été développé pour le Conseil national de recherche du Canada en tant qu'outil de sélection, afin qu'il puisse disposer d'une méthode systématique pour comparer les prédictions des devenirs de différents produits chimiques organiques, notamment les pesticides, susceptibles de pénétrer dans un environnement aquatique. Le modèle considère quatre compartiments illustrés à la figure D.1, à savoir l'eau, les fourre-tout (représentant les solides en suspension, les invertébrés ou d'autres éléments du système aquatique à l'exclusion des poissons), les sédiments et les poissons.

Le compartiment de l'air n'est pas spécifiquement inclus, mais est traité comme un puits infini, où les produits chimiques évaporés de l'eau sont éliminés en permanence du système. Cela limite l'application du modèle aux masses d'eau de dimension réduite dans lesquelles prédomine l'advection. L'environnement par défaut du modèle est un étang standard simulant un petit étang eutrophique, et un lac standard simulant un lac oligotrophique profond.

Les produits chimiques ne peuvent être ajoutés qu'au compartiment de l'eau, et peuvent s'y introduire par rejet discret, rejet continu, ou par impulsions dans un intervalle de temps donné.

Le transfert entre l'eau et les trois autres compartiments est caractérisé par une constante de vitesse. Les voies d'élimination par dégradation incluses sont la photodégradation, la volatilisation et l'hydrolyse dans l'eau; la biodégradation dans les poissons, et la dégradation microbienne dans les solides en suspension et les sédiments.

La solution dynamique, calculée à partir d'un ensemble d'équations différentielles, estime la concentration en fonction du temps. Le système calcule une «capacité de rétention» ou persistance globale. La sortie peut être obtenue sous forme de graphiques ou de tableaux.

Données requises

Le tableau D.1 représente les entrées dans le modèle sous la forme des caractéristiques de l'environnement, des propriétés physico-chimiques, et des constantes de vitesse du transfert entre les compartiments, ainsi que de la dégradation.

Résultats

On obtient les résultats sous forme de tableaux pour la solution dans des conditions constantes ou statiques, et sous forme de tableaux ou de courbes concentration-temps pour les différents compartiments, pour les solutions dynamiques. On trouvera ces résultats au tableau D.1 et à la figure D.2. Le modèle calcule également la persistance globale du système.

Applications

Le modèle a été appliqué à l'étude du devenir d'une série de chlorobenzènes émis dans l'eau, du monochlorobenzène à l'hexachlorobenzène, ainsi que d'autres produits chimiques.

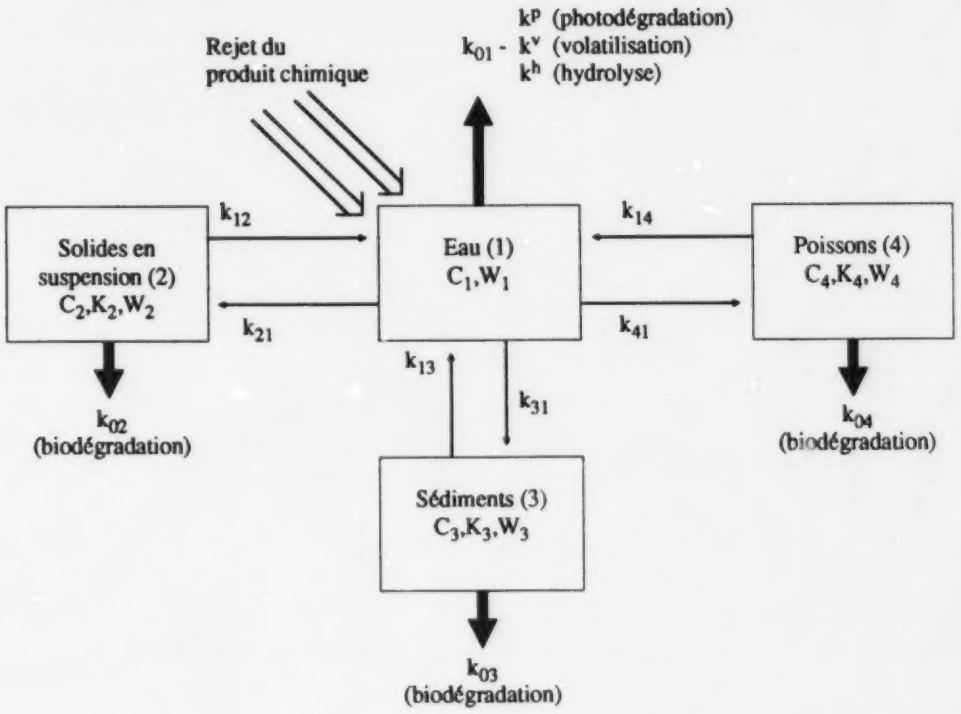
Disponibilité
Incertaine.

Ordinateur
Pas de renseignements disponibles.

Commentaires

L'intérêt de ce modèle réside dans le fait qu'il s'agit du seul modèle de ce type développé par le gouvernement fédéral canadien. Malheureusement, il semble qu'il ne soit plus utilisé. Sa force réside principalement dans son traitement de la photolyse aquatique. L'exposition des humains n'est pas calculée.

Figure D.1
Schéma élémentaire du modèle de persistance



rejet du produit chimique

transfert du produit chimique

élimination du produit chimique

C = concentration du produit chimique ($mg.L^{-1}$)
K = coefficient de partage
W = poids du compartiment (g)
k_{oi} = constante de vitesse de réaction (d^{-1})
constantes du vitesse de transfert :
k_{12} = solides en suspension → eau
k_{21} = eau → solides en suspension ($mg.g^{-1}.d^{-1}$)
k_{13} = sédiments → eau
k_{31} = eau → sédiments ($mg.g^{-1}.d^{-1}$)
k_{14} = poissons → eau
k_{41} = eau → poissons ($g^{0.2}.d^{-1}$)

où 1 = eau, 2 = solides en suspension, 3 = sédiments,
4 = poissons, 0 = hors du système, i = compartiments 1 à 4

Tableau D.1
Paramètres d'entrée du modèle de persistance[1]

Objet	Paramètre	État[2]	Objet	Paramètre	État
Caractérisation du système	- mois	De	Description du processus	- constante de vitesse d'hydrolyse (d^{-1})	M
	- latitude	De		- constante de vitesse de photo-dégradation (d^{-1})	De
	- température de l'eau (°C)	De		- constante de vitesse de volatilisation (d^{-1})	De
	- profondeur de l'eau (m)	De		- constantes de vitesse de biodégradation pour les sédiments et les solides en suspension (d^{-1})	M
	- volume d'eau (L)	De		- coefficients de partage entre l'eau et chaque compartiment	De
	- atténuation de la lumière dans l'eau (max., min.)	De		- constantes de vitesse de transfert entre l'eau et chaque compartiment	De
	- poids des sédiments (g)	De			
	- teneur en produits organiques des sédiments (%)	De			
	- concentration des solides en suspension (ppm)	De			
	- nombre de poissons	De			
	- poids moyen des poissons (g)	De			
	- émissions chimiques ($mg.d^{-1}$)	De			
Caractérisation des agents polluants	- point de fusion (°C)	M			
	- poids moléculaire (g)	M			
	- pression de vapeur (mm Hg)	M			
	- solubilité dans l'eau ($mg.L^{-1}$)	O-C			
	- coefficient de partage octanol-eau	O-C			
	- fraction de produits chimiques biodégradables par les poissons (X)	M			
	- rendement quantique et coefficients d'extinction pour 290-400 nm	M			

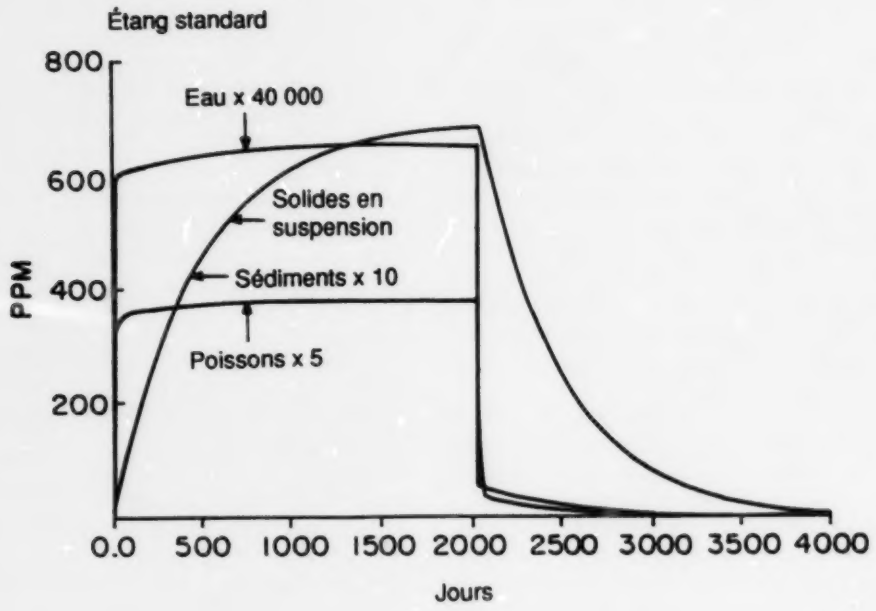
1 Pour plus de détails, voir NRCC 1981b.
2 De = valeur par défaut - valeur fournie directement par le programme; on peut introduire directement les valeurs désirées;
M = entrée obligatoire, nécessaire pour l'analyse par ordinateur;
O-C = entrée facultative, conditionnelle; il faut introduire soit la solubilité dans l'eau, soit le coefficient de partage octanol-eau.

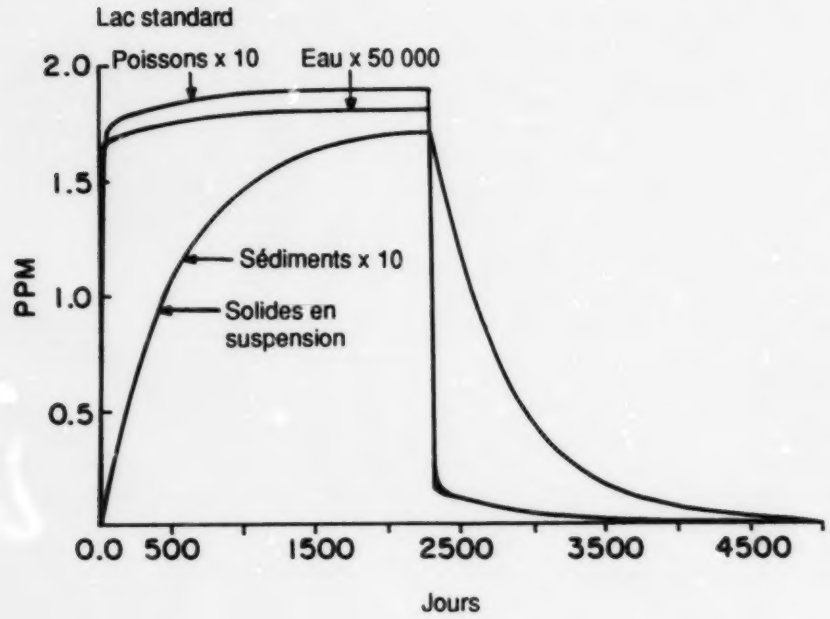
Tableau D.2
Prédiction des voies de distribution et de dégradation de l'hexachlorobenzène en régime permanent à l'aide du modèle de persistance et des paramètres de l'étang standard et du lac standard

Paramètre du système	Étang standard	Lac standard
Capacité de rétention dans le système (d)	65,29	60,32
Demi-vie de premier ordre dans le système (d)	45,25	41,81
Fraction du composé dans :		
eau	0,009	0,059
solides en suspension	0,024	0,016
sédiments	0,966	0,924
poissons	ND[1]	0,002
Fraction de l'élimination totale du système due à :		
volatilisation	0,929	0,372
photodégradation	0,038	0,609
hydrolyse	ND	ND
dégradation dans les solides en suspension	0,001	ND
dégradation dans les sédiments	0,032	0,014
dégradation dans les poissons	0,001	0,005
Estimations de la bioconcentration pour :		
poissons	5 248,07	5 248,07
mollusques	36 372,09	36 372,09
crustacés	3 257,47	3 257,47

1 Below number of significant figures used in program, ≤ 0,001.

Figure D.2
Accumulation d'hexachlorobenzène avant, pendant et après l'instauration du régime permanent dans les compartiments de l'étang standard et du lac standard du modèle de persistance





Modèle E

Nom :

Environmental Exposure Potentials (EEP)

Type de modèle :

Modèle d'exposition multimédia.

Référence :

i) Methode 503, Draft Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods for Chemicals, OECD Chemicals Group and Management Committee, Hazard Assessment Panel (sous presse 1988).

ii) Klein, W., Kordel, W., Klein, A.W., Kuhnen-Clausen, D., Weiss, M. Systematic approach for environmental hazard ranking of new chemicals, Chemosphere 7: 1445-1462, 1988.

Personne-ressource :

Prof. Dr W. Klein, Fraunhofer-Institute fur Umweltchemie und Ökotoxikologie, D-5948 Schmallenberg-Grafschaft, Umweltbundesamt, Bismarckplatz 1, D-1000 Berlin 33

Description

EEP est un modèle de compartimentation à l'équilibre basé sur la fugacité, utilisé par les États membres de la CEE pour déterminer le potentiel d'exposition des nouveaux produits chimiques organiques. La méthodologie est appliquée aux produits chimiques importés ou produits par quantités d'au moins une tonne par année. L'évaluation dépend des données de la déclaration avant commercialisation, du type d'usage prévu, du volume de production, des propriétés physico-chimiques, des vitesses de dégradation et du potentiel d'accumulation des nouveaux produits chimiques.

La méthodologie, qui est simple, traite les sources multiples ou diffuses, mais ne fait pas de distinction entre les émissions continues et les émissions intermittentes.

Le modèle calcule la répartition dans l'environnement, la quantité dans l'environnement, la dégradation et le potentiel d'accumulation dans l'air, l'eau et le sol, et a recours à des facteurs de pondération pour produire un «profil» d'exposition.

La classification générale des types d'usage d'un produit chimique est la suivante : i) intermédiaire, indiquant qu'un maximum de 3 p. 100 de la production entre dans l'environnement; ii) traitement, où 10 p. 100 est libéré; et iii) utilisation finale, où la totalité de la quantité pénètre dans l'environnement.

La dégradation abiotique n'est pas incluse, car on prétend que cela sous-entend la transformation en un autre produit chimique, par opposition à la dégradation formant des substances comme H_2O et CO_2.

Le système attribue des cotes à chaque critère, les additionne et les normalise pour permettre une évaluation standard.

On peut combiner le «profil» d'exposition avec les données sur les effets pour obtenir une évaluation totale des dangers.

Données requises

Les données sur les propriétés physico-chimiques, solubilité, tension de vapeur et coefficient de partage octanol/eau sont nécessaires, ainsi que la classification des types d'usage.

Résultats

La répartition dans l'environnement est calculée en pourcentage et en quantité dans l'air, l'eau et le sol; l'accumulation et la biodégradation sont également calculées pour chacun de ces milieux. Des cotes individuelles sont attribuées, une cote totale normalisée est calculée, et un profil d'exposition est produit. On trouvera un exemple des données d'entrée et des cotes au tableau E.1 et un profil d'exposition à la figure E.1.

Applications

Le système est utilisé pour chaque nouveau produit chimique faisant l'objet d'une déclaration. Les résultats pour 25 produits chimiques ont été examinés par des experts et jugés acceptables.

Ordinateur

Le modèle EEP fonctionne sur un IBM-XT avec le système d'exploitation DOS et des cartes graphiques. Il est écrit en Turbo Pascal à l'aide de TURBO.EXTENDER et du «Turbo Graphics Toolbox».

Disponibilité

Communiquer avec le docteur Klein.

Commentaires

Ce modèle est pertinent car il calcule directement le devenir des produits chimiques dans l'environnement. Il ne traite pas l'exposition par le contact avec différents milieux, bien que cet aspect fasse actuellement l'objet de recherches. Il a également l'avantage d'être utilisé dans les pays membres de la Communauté européenne. Ce groupe allemand est très actif et très réputé dans le domaine de l'évaluation des produits chimiques en Europe, et il doit être considéré comme un chef de file en la matière. Il convient donc de surveiller ses travaux de près.

Tableau E.1
Imprimé des données d'entrée et des résultats

I. S221-04-01

Données physico-chimiques

Point de fusion (K)	: 298,9500	Qualité: o.k.
Point d'ébullition (K)	: 649,1000	Qualité: calculé
Masse volumique (g/ml)	: 1,113500	Qualité: o.k.
Tension de vapeur (Pa)	: 0,001210	Qualité: o.k.
Solubilité dans l'eau (g/L)	: 0,006150	Qualité: o.k.
Coefficient de partage octanol-eau log (P_{ow})	: 4,540000	Qualité: o.k.
Solubilité dans les graisses (mg/100g)	: 100000,0	Qualité: extrapolé
Tension superficielle (N/m)	: 0,065000	Qualité: o.k.

Données de dégradation

Biodégradation	: prêt	
Hydrolyse (d)	: 30,000	Qualité: o.k.
Photolyse (d)	: aucunes données	
BOD (g/g)	: 1,280000	Qualité: o.k.
COD (g/g)	: 2,090000	Qualité: o.k.

II. Résultats relatifs à l'exposition

Partage selon niveau 1 de Mackay

Pourcentage/tonnage dans l'air	: 0,24% =	0,24 t/a*
Pourcentage/tonnage dans le sol	: 43,23% =	43,23 t/a
Pourcentage/tonnage dans l'eau	: 56,53% =	56,53 t/a
Pourcentage/tonnage dans les sédiments	: 40,42% =	40,42 t/a
Pourcentage/tonnage dans la biote	: 0,03% =	0,03 t/a

Exposition dans l'air

Partage initial	: 0,00 sur	2,00 points
Quantité dans compartiment	: 0,00 sur	2,00 points
Exposition totale	: 0,00 sur	7,00 points = 0 %

Exposition dans le sol

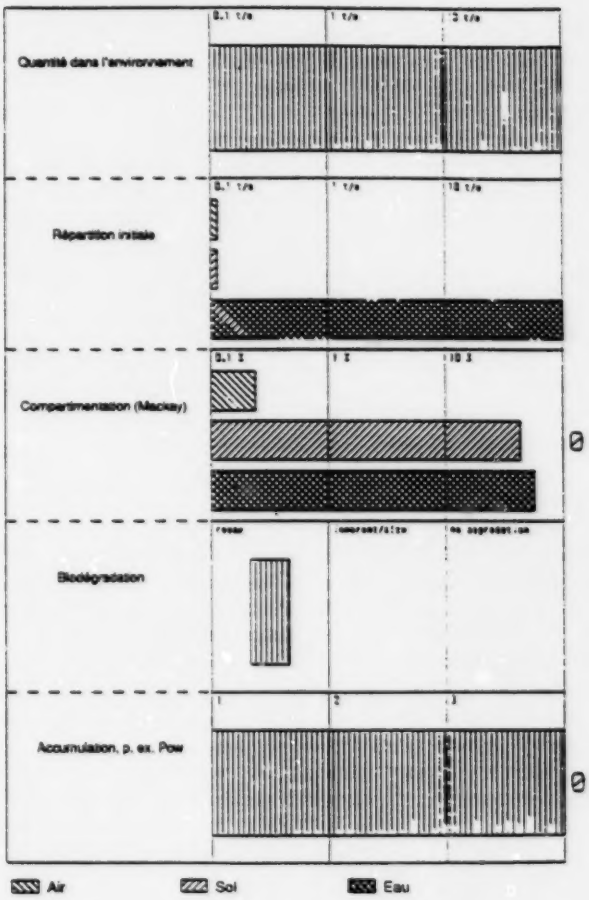
Partage initial	: 0,00 sur	2,00 points
Quantité dans compartiment	: 4,00 sur	4,00 points
Accumulation	: 1,00 sur	1,00 point
Biodégradation	: -2,00 sur	-2,00 points
Exposition totale	: 3,00 sur	7,00 points = 43 %

Exposition dans l'eau

Partage initial	: 2,00 sur	2,00 points
Quantité dans compartiment	: 4,00 sur	4,00 points
Accumulation	: 1,00 sur	1,00 point
Biodégradation	: -2,00 sur	-2,00 points
Exposition totale	: 5,00 sur	7,00 points = 71 %

* tonne par année

Figure E.1
Profil des paramètres
Exposition à la substance S221-04-01



Modèle F

Nom :

The Environmental Paritioning Model (ENPART)

Type :

Modèle compartimental multimédia.

Référence :

i) Method 505, Draft Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods for Chemicals, OECD Chemicals Group and Management Committee, Hazard Assessment Panel (sous presse 1988).

ii) Environmental partitioning Model Draft Documentation, Office of Toxic Substances, US EPA, 1982.

Personne-ressource :

Exposure Evaluation Division, Office of Toxic Substances (TS-798), US Environmental Protection Agency, 401 M Street, SW, Washington, DC 20460 USA. À l'attention de : Russel S. Kinerson

Description

Le modèle ENPART, développé par l'EPA américaine, permet de faire une analyse de dépistage préliminaire des produits chimiques libérés dans l'environnement. Le modèle est basé sur la fugacité et calcule les rapports de concentrations à l'équilibre et dans des conditions constantes entre les compartiments. Il identifie les voies dominantes et estime la persistance du produit chimique ainsi que le potentiel de bioconcentration. Le système calcule également la distribution massique relative et les vitesses de transfert et de transport. Il considère les compartiments de l'air, de l'eau et du sol, ainsi que quatre sous-compartiments aquatiques : les sédiments, les sédiments en suspension, la biote et les ions considérés en équilibre avec l'eau. Le modèle est principalement destiné aux produits chimiques évalués pour fins d'essai.

Données requises

Les données sur les propriétés physico-chimiques, solubilité, tension de vapeur et coefficient de partage octanol/eau, les coefficients du sol et des sédiments sont nécessaires, ainsi que certaines informations sur l'environnement comme la masse volumique du sol et des sédiments, les concentrations dans les sédiments et la biote. Les flux advectifs ne sont pas compris.

Résultats

Les résultats sont produits sous la forme de rapports de concentrations entre les compartiments plutôt que de valeurs absolues.

Applications

Le modèle est utilisé par l'EPA américaine pour identifier les milieux d'accumulation et indiquer les essais pertinents. Son rôle dans l'évaluation des données avant fabrication n'est pas clair.

Ordinateur

Le modèle ENPART est écrit en FORTRAN et fonctionne soit sur un VAX11/780, soit sur un IBM PC. La version pour IBM PC est disponible sur une disquette.

Disponibilité

Communiquer avec Russell Kinerson.

Commentaires

L'EPA américaine dispose de plusieurs modèles et bases de données pour faciliter l'évaluation des produits chimiques au siège de l'organisme à Washington. Les données fournies au moyen de leur Premanufacturing Notification System sont incomplètes; par conséquent, les méthodes employées sont approximatives et dépendent énormément des procédures d'estimation et du jugement personnel. Les exigences stipulées dans la LCPE étant plus détaillées, l'intérêt de modèles tels que celui-ci reste à déterminer. L'examen des pratiques de l'EPA n'en revêt pas moins un grand intérêt.

Modèle G

Nom :
TOXSCREEN

Type de modèle :
Modèle multimédia.

Références :
i) Method 604, Draft Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods for Chemicals, OECD Chemicals Group and Management Committee, Hazard Assessment Panel (sous presse 1988).

ii) Hetrick, D.M., McDowell-Boyer, L.M. User's manual for TOXSCREEN: A multi-media screening level program for assessing the potential fate of chemicals released to the environment. Draft Report. Oak Ridge National Laboratory ORNL/TM-8570. Washington DC : Office of Pesticides and Toxic Substances, US EPA (contrat nº W-7405-eng-26).

Personne-ressource :
Exposure Evaluation Division, Office of Toxic Substances (TS-798), US Environmental Protection Agency, 401 M Street, SW, Washington, DC 20460 USA. À l'attention de : Russell S. Kinerson

Description
TOXSCREEN est un modèle de sélection multimédia en fonction du temps, que l'on utilise pour déterminer le potentiel de transport et d'accumulation dans l'environnement de produits chimiques libérés dans l'air, l'eau ou le sol. Il identifie en principe les produits chimiques qui ne sont pas susceptibles de constituer un danger.

Le modèle est générique par nature et incorpore des modules sophistiqués pour le transport dans l'air, l'eau et le sol.

Les fichiers de données contiennent des informations sur les données générales climatologiques et pédologiques de différentes régions des États-Unis. Les emplacements des masses d'eau et des terres par rapport aux sources dans l'atmosphère doivent être précisés, de même que les dimensions du milieu. On suppose qu'une source ponctuelle atmosphérique touche une masse d'eau si elle existe, en un point situé immédiatement sous le vent par rapport à la concentration maximale du panache.

La dispersion atmosphérique sous le vent à partir d'une source ponctuelle est estimée à l'aide d'une équation de dispersion de panache de Gauss modifiée. La migration des produits chimiques dans le sol est estimée au moyen du modèle de compartimentation saisonnier dans le sol (SESOIL). Le devenir et le transport dans l'eau sont modélisés à l'aide du modèle EXAMS. Ces deux derniers modèles ont été élaborés par l'EPA américaine. La dispersion dans les estuaires et les océans est également incorporée. On ne prend pas en considération les interactions entre les eaux littorales et l'air.

TOXSCREEN estime la bioaccumulation dans les organismes aquatiques, ainsi que dans les aliments, les animaux et les plantes terrestres.

Données requises
Ce modèle nécessite l'introduction d'un grand nombre de données, notamment les informations sur les caractéristiques de l'environnement d'application et les sources d'émission; les paramètres chimiques et de dégradation; et les paramètres climatologiques, météorologiques et hydrologiques. L'entrée des données dépend du domaine d'application, c'est-à-dire du type d'environnement, celui-ci pouvant être terrestre ou aquatique.

Résultats
Estimation du devenir des produits chimiques dans un intervalle de temps donné.

Applications
Le modèle a été utilisé pour l'évaluation de l'exposition à des produits chimiques nouveaux et existants en vertu du Toxic Substances Control Act (TSCA).

Disponibilité
Communiquer avec Russell Kinerson.

Ordinateur
Le code est écrit en FORTRAN, et le modèle fonctionne sur un ordinateur VAX11/780 et un système d'exploitation VMS.

Commentaires
Il s'agit de l'une des séries de modèles de l'EPA mentionnées dans les commentaires du modèle F.

Modèle H

Nom :

Exposure Commitment Method

Type de modèle :

Calcul de l'évaluation de l'exposition (il ne s'agit pas explicitement d'un modèle)

Références :

i) Bennett, B.G. «The exposure commitment method in environmental pollutant assessment.» Environ. Monit. and Assessment 1:21-36, 1981.

ii) Bennett, B.G. MARC reports No. 12, 23. Chelsea College, Londres, R.-U.

Personne-ressource :

B.G. Bennett, Monitoring and Assessment Research Centre, Chelsea College, University of London, London, England SW10

Description

La méthode d'exposition globale est une approche non dépendante du temps pour l'évaluation de l'exposition humaine aux agents polluants de l'environnement. En bref, elle calcule l'exposition cumulée par différentes voies pour un rejet dans l'environnement constant et continu. Elle a d'abord été utilisée par le Comité scientifique des Nations Unies sur les effets des radiations atomiques (UNSCEAR) pour estimer l'exposition due au mouvement des radionucléides dans l'environnement. Elle a depuis été modifiée pour être appliquée aux composés organiques et aux métaux.

La méthodologie considère les teneurs moyennes dans l'air, l'eau et le sol (et éventuellement d'autres milieux) pour procéder à deux évaluations : l'**exposition** globale et l'**absorption** globale.

L'**exposition** globale quantifie l'intensité et la durée de l'émission d'un produit chimique dans l'environnement et est décrite comme l'intégrale de temps de la concentration, pour un temps spécifié, dans chaque compartiment de l'environnement. L'exposition globale est donc l'aire sous la courbe concentration-temps.

L'**absorption** globale décrit l'absorption cumulative par un compartiment et est décrite par l'intégrale de temps du flux dans le compartiment.

Dans les calculs de l'exposition, les facteurs de transfert des polluants entre les compartiments sont exprimés par le rapport de l'**exposition** ou de celui de l'**absorption** pour les deux compartiments, ou d'une combinaison des deux. À l'équilibre, le facteur de transfert est équivalent au rapport des teneurs, dans des conditions constantes, dans les compartiments adjacents.

Les **expositions** ou **absorptions** globales sont calculées de manière séquentielle par une succession de compartiments pour chaque voie. Les voies parallèles des compartiments donneurs aux compartiments récepteurs sont prises en considération. Par exemple, on pourrait inclure dans l'exposition l'inhalation de l'air et l'ingestion terrestre et aquatique.

Les résultats obtenus pour chaque voie parallèle sont évalués et additionnés pour produire l'exposition totale. Cette méthodologie permet d'évaluer la contribution relative de chaque voie à l'exposition totale. La méthode fournit un cadre pour l'évaluation de l'exposition, plutôt qu'un véritable modèle informatique.

Données requises

Le principal effort à fournir est la synthèse et l'évaluation des données disponibles. Les données requises, qui ne sont pas trop nombreuses, incluent les informations relatives aux teneurs approximatives dans des conditions constantes, ou aux niveaux de l'environnement pendant un intervalle de temps donné, pour différents compartiments. Lorsqu'on ne dispose pas des données, on peut utiliser les relations à l'équilibre observées entre les différents compartiments. Il peut également être nécessaire de fournir les données sur les taux d'ingestion et d'inhalation, ainsi que sur le temps de séjour des produits chimiques dans les différents milieux.

Résultats

Évaluation de l'exposition relative par chaque voie. On trouvera au tableau H.1 une évaluation des niveaux de plomb chez l'humain et dans l'environnement.

Applications

La méthodologie a été appliquée à une grande variété de polluants, notamment le plomb, le cadmium, l'arsenic, le nickel, les BPC et le 2,3,7,8-TCDD.

Ordinateur

N'est pas disponible sous forme informatisée.

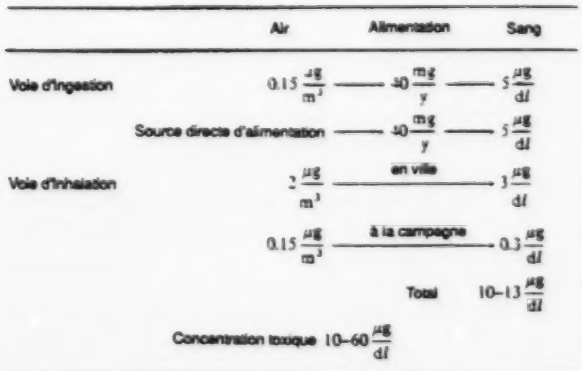
Disponibilité

S'adresser à la personne-ressource.

Commentaires

Cette approche est intéressante, car elle est établie et acceptée depuis très longtemps.

Tableau H.1
Niveaux de plomb dans l'environnement et chez les humains



Modèle I

Nom :

Preliminary Pollutant Limit Value (PPLV)

Type de modèle :

Calcul pour l'évaluation de l'exposition (il ne s'agit pas explicitement d'un modèle).

Référence :

i) Rosenblatt, D.H., Dacre, J.C., Cogley, D.R. «An environmental fate model leading to preliminary pollutant limit values for human health effects», *in* Environmental Risk Analysis for Chemicals, Ed. R.J. Conway, Van Nostrand Reinhold Co., New York, 1980.

ii) Dacre, J.C., Rosenblatt, D.H., Cogley, D.R. «Preliminary pollutant limit values for human health effects», Environ. Sci. Technol. 14: 777-783, 1980.

Personne-ressource :

Dr D.H. Rosenblatt, U.S. Army Biomedical Research and Development Laboratory, Bldg. 568, Fort Detrick, Frederick, MD 21701-5010, USA

Description

Cette méthode d'évaluation détaillée de l'exposition a été développée pour l'armée américaine afin d'estimer les niveaux admissibles d'un polluant dans les différents milieux de l'environnement, en prenant en considération les effets sur la santé humaine. On estime qu'elle produit une norme temporaire, une valeur limite préliminaire du polluant (VLPP) en l'absence d'une autre valeur réglementaire. Une VLPP ou teneur admissible est établie pour chaque milieu.

Les voies d'exposition au polluant considérées sont l'air, l'eau, la vapeur atmosphérique et les particules en tant que sources, et les cultures, les animaux domestiques et les poissons en tant que cibles. Les voies d'exposition sont identifiées pour chaque milieu; par exemple, l'exposition par l'intermédiaire de l'eau peut être due à la consommation de poisson et à l'ingestion d'eau. La figure I.1 illustre les voies d'exposition possibles du sol par l'intermédiaire de l'eau.

Une seule VLPP par voie (SVLPP) est calculée pour chaque voie d'exposition identifiée dans un milieu. Cette VLPPV est en fait la teneur maximale dans le milieu qui ne produit pas d'exposition inacceptable par cette voie. Les VLPPV pour chaque voie sont normalisées pour donner une seule VLPP pour le milieu considéré. Les calculs prennent en considération les caractéristiques de répartition dans l'environnement, l'apport journalier admissible (AJA) et la vitesse d'absorption. On suppose que le polluant est en équilibre par paliers ou en régime statique de la source au récepteur. Les calculs sont en général basés sur les données de toxicité à long terme, bien qu'ils puissent être adaptés aux groupes sensibles. Lors des calculs, il faut utiliser son jugement et prendre en compte certaines considérations spécifiques au site, par exemple, déterminer si l'eau souterraine peut être diluée avant d'atteindre le puits le plus proche. La méthodologie d'évaluation des données requises nécessite une certaine expertise et un bon jugement. On trouvera au tableau I.1 un exemple des calculs, la nomenclature étant définie au tableau I.2.

Données requises

Les paramètres requis incluent les taux d'inhalation d'air et d'absorption d'aliments et d'eau, les données sur les propriétés de répartition et les vitesse de dégradation, ainsi que les effets chroniques.

Résultats

Le système calcule un niveau admissible du polluant dans chaque milieu de l'environnement.

Applications

Le système a été appliqué à des composés organiques (notamment l'aldrine, l'endrine et le toluène), à l'arsenic et au mercure.

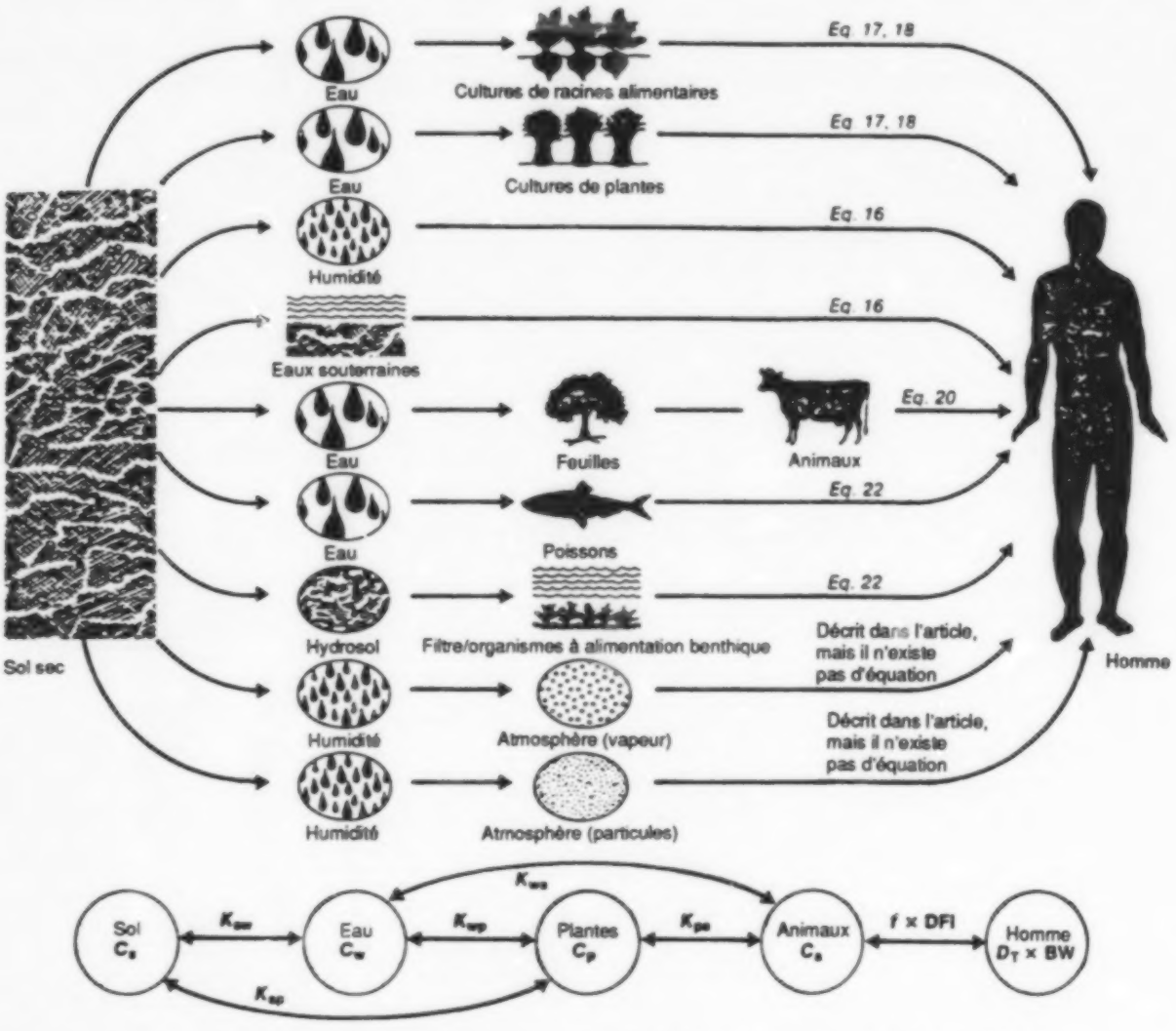
Ordinateur

Non disponible sous forme informatisée.

Commentaires

Cette méthode fut l'une des premières procédures de calcul de l'exposition humaine aux produits chimiques en Amérique du Nord. Sa principale fonction est d'établir des niveaux après nettoyage ou des teneurs admissibles, en particulier pour les sites désaffectés par l'armée. L'auteur est très réputé dans ce domaine.

Figure I.1
Voies conduisant du sol à l'homme, par les compartiments eau, plantes et animaux[a]



[a]La dose journalière admissible de substance toxique pour ce modèle de devenir, est indiquée dans six sources de documentation. L'équation permettant de calculer la dose journalière admissible est :

$$D_T = \frac{f \times DFI \times C_a}{BW} = K_{pa} \times K_{wp} \times K_{sw} \times C_s \times f \times DFI/BW \quad (Éq. 2)$$

Tableau I.1
Fiche de travail du modèle PPLV (avec valeurs calculées de l'hexachlorobutadiène venant du sol)

Formules et calculs	Équation
1. Ingestion d'eau $C_s = 35\ D_T/K_{sw} = 35 \times 5 \times 10^{-7}/(3{,}84 \times 10^{-3})$ $= 4{,}6 \times 10^{-3}$ mg.kg^{-1} (SPPPLV)	(15-16)
2. Cultures de racines alimentaires $C_s = BW \times D_T/(K_{sw} \times f \times DFI)$ $= 70 \times 5 \times 10^{-7}/(3{,}84 \times 10^{-3} \times 33 \times 0{,}1 \times 0{,}63)$ $= 4{,}4 \times 10^{-3}$ mg.kg^{-1} (SPPPLV)	(15-17)
3. Cultures de céréales $C_s = BW \times D_T/(K_{sw} \times K_{wp} \times f \times DFI)$ (non considéré)	(15-17)
4. Viande (par accumulation à vie, mais voir texte de la section 15-2.4) $C_s = BW \times D_T/(K_{sw} \times K_{wp} \times f \times DFI)$ $= 70 \times 5 \times 10^{-7}/(3{,}84 \times 10^{-3} \times 33 \times 36 \times 0{,}2 \times 0{,}63)$ $= 6{,}09 \times 10^{-3}$ mg.kg^{-1} (SPPPLV)	(15-20)
5. Ingestion de poisson $C_s = BW \times D_T/(K_{sw} \times K_{wf} \times f \times DFI)$ $= 70 \times 5 \times 10^{-7}/(3{,}84 \times 10^{-3} \times 1{,}2 \times 10^{3} \times 0{,}05 \times 0{,}63)$ $= 2{,}41 \times 10^{-4}$ mg.kg^{-1} (SPPPLV)	(15-22)
6. $C_{air} = 3{,}78\ D_T$ $= 3{,}78 \times 5 \times 10^{-7}$ $= 1{,}89 \times 10^{-6}$ mg.m^{-3}	(15-26)
$VD_0 = 54\ P_0$ (mm Hg) $\times$ MW $= 1{,}4 \times 10^{4}$ mg.m^{-3} La valeur élevée du rapport VD_0/C_{air}, soit $7{,}4 \times 10^{9}$, indique que l'exposition par la route de la vapeur présente un danger.	(15-24)
7. Normalisation Seules les routes 1, 2, 4 et 5 sont normalisées. $C_{sf} = (1/0{,}0046 + 1/0{,}0044 + 1/0{,}0000609 + 1/0{,}000241)^{-1}$ $= 4{,}8 \times 10^{-5}$ mg.kg^{-1}	(15-34)
8. Comparaison de C_{wf} et de C_{wi} $C_{wf} = K_{sw}C_{sf} = 3{,}84 \times 10^{-3} \times 4{,}8 \times 10^{-5}$ mg.litre^{-1} $= 1{,}84 \times 10^{-7}$ mg.litre^{-1} $C_{wi} = 4{,}76$ mg.litre^{-1} $\therefore C_{wi} > C_{wf}$, de sorte que la solubilité n'est pas un facteur limitant.	(15-33)

Tableau I.2
Symboles et abréviations employés dans les calculs

ADI	=	dose journalière admissible mg.kg^{-1}.jour^{-2}
BW	=	poids corporel (humain), kg
C_s	=	concentration limitante d'un polluant dans un animal alimentaire, d'ordinaire bétail, mg.kg^{-1}
C_p	=	concentration limitante de polluant dans une culture utilisée comme aliment chez l'humain ou l'animal, mg.kg^{-1}
C_s	=	concentration de polluant dans le sol limitante pour les effets sur la santé, mg.kg^{-1}
C_{sf}	=	valeur C_s finale (PPLV), mg.kg^{-1}
C_{si}	=	valeur C_s initiale (SPPPLV), mg.kg^{-1}
C_w	=	niveau de polluant dans l'eau limitant pour les effets sur la santé, mg.L^{-1} = mg.kg^{-1}
C_{wf}	=	valeur C_s finale (PPLV), mg L^{-1} = mg.kg^{-1}
C_{wi}	=	valeur C_s initiale (SPPPLV), mg L^{-1} = mg.kg^{-1}
DFI	=	apport alimentaire journalier, kg.jour^{-1}
D_T	=	dose journalière admissible d'une substance toxique, mg kg^{-1} jour^{-1}
f	=	fraction de l'alimentation totale représentée par un aliment d'une catégorie donnée
K_{ps}	=	C_s/C_p
K_{wp}	=	C_p/C_w
K_{sw}	=	C_w/C_s
K_{ws}	=	C_s/C_w
K_{wf}	=	concentration dans les poissons/Cw, c'est-à-dire facteur de bioconcentration
K_{wp}	=	C_p/C_w
LD50	=	niveau d'une seule dose qui tue 50 p. 100 d'un groupe d'animaux d'essai d'une espèce donnée (et de préférence d'une souche et d'un sexe donnés) après 14 jours d'observation des animaux mg.kg^{-1}
MCL	=	niveau maximal de contaminant (limite provisoire dans l'eau) dans l'eau mg.L^{-1} = mg.kg^{-1}
NEL_L	=	niveau sans effet (chronique) à vie, mg.kg^{-1}.jour^{-1}
NEL_{90}	=	niveau sans effet (sous-chronique) pendant 90 jours, mg.kg^{-1}.jour^{-1}
PPLV	=	valeur limite préliminaire du polluant, mg.L^{-1} ou mg.kg^{-1}
ppm	=	parties par million (mg.L^{-1} dans l'eau, mg.kg^{-1} dans le sol, les animaux ou les organismes vivants)
RB	=	taux de respiration, volume d'air respiré par un être humain de 70 kg en 24 heures, m^3.jour^{-1}
RB'	=	taux de respiration, volume d'air respiré par un être humain de 70 kg au cours d'une journée de travail de 8 heures, m^3.jour^{-1}
SPPPLV	=	valeur limite préliminaire de polluant pour une seule voie, mg.L^{-1} ou mg.kg^{-1}
T	=	température, degrés Kelvin
TLV	=	valeur limite de seuil pour l'exposition en milieu de travail aux polluants toxiques présents dans l'air pour une semaine de 40 heures, mg.m^{-3} (ou ppm)
W_w	=	absorption d'eau journalière, L.jour^{-1} = kg.jour^{-1}
^{3}mg m^{-3}	=	ppm $\times$ MW/24 au 25°C

Modèle J

Nom :

Modèles basés sur la fugacité.

Type de modèle :

Modèle d'exposition multimédia.

Référence :

Mackay, D., Paterson, S. «Evaluating the regional multimedia fate of organic chemicals : a level III fugacity model», soumis à Environ. Sci. Technol. Sous presse 1990.

Personnes-ressources :

D. Mackay ou S. Paterson, Department of Chemical Engineering, University of Toronto, Toronto (Ontario) M5S 1A4. Téléphone : D. Mackay – (416) 978-4019, S. Paterson – (416) 978-5873

Description

Au cours de la dernière décennie, plusieurs modèles ont été mis au point à l'Université de Toronto par Mackay, Paterson et leurs collaborateurs. Ces systèmes comprennent des modèles simples (niveau I) décrivant le devenir des produits chimiques persistants à l'équilibre; les modèles de niveau II, qui incluent la réaction et l'advection, les modèles de niveau III, qui traitent le transport entre différents milieux dans des conditions constantes, et les modèles de niveau IV, qui abordent les conditions variant en fonction du temps. Le modèle le plus pertinent pour la présente discussion est un modèle récent de niveau III mis au point pour le ministère de l'Environnement de l'Ontario.

Ce modèle environnemental multimédia basé sur la fugacité considère quatre compartiments généraux : l'air, l'eau, le sol et les sédiments. On estime que chaque phase générale est constituée de sous-compartiments dont les fractions d'air, d'eau et de matière organique sont variables. On suppose que l'équilibre règne dans chaque compartiment, mais pas entre des compartiments différents.

La résolution algébrique du modèle fait appel à des expressions pour les processus d'émission, de transfert diffusif et non diffusif, les flux advectifs et les réactions de dégradation.

Le modèle calcule la répartition dans des conditions constantes d'un produit chimique et sa persistance dans l'environnement. Il détermine les milieux d'accumulation et les voies de transfert prédominantes. Les teneurs dans l'environnement prévues par le modèle peuvent être combinées avec les taux d'inhalation par l'air et d'ingestion par l'eau et les aliments afin d'obtenir une estimation préliminaire de l'exposition des humains.

La répartition des produits chimiques entre les phases est exprimée par rapport au critère d'équilibre de la fugacité. La fugacité peut être considérée comme un substitut de la concentration et elle est reliée à la concentration par une capacité de fugacité Z. Ces valeurs Z sont calculées à partir des propriétés physico-chimiques suivantes : masse moléculaire, tension de vapeur, solubilité et coefficient de partage octanol-eau, de même que la masse volumique et la proportion de matière organique dans la phase où se trouve le produit chimique.

Ces valeurs Z, qui sont équivalentes à la moitié du coefficient de partage, caractérisent chaque phase de manière indépendante.

Le transfert diffusif entre l'air et l'eau, l'air et le sol, et l'eau et les sédiments, est estimé à partir des coefficients de transfert de masse, des aires des interfaces, de la diffusivité et de la longueur du trajet.

Les processus non diffusifs incluent les dépôts atmosphériques humides et secs, le lessivage par les eaux souterraines, le dépôt de sédiments, l'enfouissement, la resuspension et le ruissellement du sol, et sont estimés à partir d'un débit, de la valeur Z et de la fugacité.

On tient compte de la dégradation qui a lieu dans chaque compartiment ou sous-compartiment par l'intermédiaire d'une constante de vitesse.

Les équations du modèle incorporent des expressions pour le flux advectif des produits chimiques à destination et en provenance d'une région. Les émissions de produit chimique dans chaque phase doivent être quantifiées.

Quatre équations de bilan massique représentant les quatre phases générales sont résolues en fonction de la fugacité. Les concentrations et les quantités sont fixées à la même valeur que celles des phases générales. Par conséquent, les concentrations et les quantités dans les sous-compartiments peuvent être facilement calculées.

Données requises

Les données requises comprennent un ensemble minimal de caractéristiques environnementales régionales incluant les dimensions volumétriques, les proportions relatives de fluide, de gaz et de solides dans chaque phase, les masses volumiques, et les proportions de matière organique; les taux d'émission des produits chimiques, ainsi que les propriétés physico-chimiques suivantes : tension de vapeur, solubilité et coefficient de partage octanol-eau et enfin, la réactivité des produits chimiques sous la forme de constantes de vitesse.

Résultats

Les résultats fournis par le modèle comprennent les propriétés d'entrée des produits chimiques, les constantes de vitesse de réaction, les taux d'émission, les dimensions et les concentrations naturelles (flux advectif entrant) ainsi que les propriétés de tous les compartiments généraux et sous-compartiments. Les teneurs, les quantités et les fugacités sont indiquées pour chaque phase et sous-phase. Les vitesses de transfert et de transformation sont données pour les processus individuels et combinés, et un bilan massique total est produit.

Applications:

Le modèle a été appliqué aux BPC, au benzène, à l'hexachlorobenzène, au benzo(a)pyrène, au mirex et au trichloroéthylène dans la région du sud de l'Ontario. Les résultats illustrés au tableau J.1 sont conformes, en ce qui concerne la grandeur, aux données existantes disponibles. On estime que le

modèle est utile pour la prévision du devenir dans l'environnement et de l'exposition des humains des produits chimiques organiques persistants qui sont libérés de manière plus ou moins continue dans l'environnement.

Ordinateur

Disponible sur disquette pour IBM-PC.

Disponibilité

On peut se procurer ce modèle, selon la formule de recouvrement de fonds, auprès de D. Mackay ou S. Paterson, à l'Université de Toronto, pour la somme de 30 $.

Commentaires

Il s'agit probablement du modèle de calcul du devenir dans l'environnement le plus perfectionné qui ait été mis au point pour les conditions environnementales canadiennes. Il a été récemment amélioré pour inclure l'évaluation de l'exposition des humains, mais aucune publication n'est encore disponible, bien que les principes généraux aient été décrits dans un chapitre de l'ouvrage «Carcinogenic Risk Assessment», sous la direction de Travis.

Tableau J.1
Concentrations calculées et relevées pour les quatre phases générales, les poissons, et les fugacités des phases générales

Composé	Air (ng/m^3)		Eau (ng/L)		Sol (mg/kg)		Sédiments (ng/g)		Poissons (mg/kg)		Fugacités des phases générales (Pa)			
	calculée	relevée	calculée	relevée	calculée	relevée	calculée	relevée	calculée	relevée	Air	Eau	Sol	Sédiments
6-CB	1.4	1-10 (28)	5	1-10 (28)	.04	.01-.02 (28)	80	10-100 (28)	.2	N.D.-1.7 (28)	$7.8x10^{-9}$	$8.7x10^{-8}$	$1.4x10^{-7}$	$2.2x10^{-7}$
Benzène	2500	16000 (29) (N.D.-280000)	280	<10000 (29)	.00001	-	0.5	-	.002	-	$8.0x10^{-5}$	0.0021	$8.0x10^{-5}$	0.0021
BAP	3.0	1.32 (29) 7.1 (22) 4.7 (23)	11	28.2 (23)	.04	.1 (29) .1 (22) .3-.5 (23)	190	80-300 (29)	0.26	.14 (29)	$1.8x10^{-10}$	$1.1x10^{-9}$	$1.1x10^{-9}$	$4.5x10^{-9}$
HCB	.2	.2 (29)	1.3	.05-1 (29)	.0009	-	7	3-100 (29)	.01	.05 (30) .003 (31)	$1.9x10^{-9}$	$2.8x10^{-7}$	$1.4x10^{-7}$	$9.2x10^{-7}$
Mirex	.0001	-	.002	.002 (32) 30 (29) <1 (33)	$8x10^{-6}$	-	.07	20 (29) 68 (34)	.0001	.003 (30) N.D.-.04 (29)	$2.5x10^{-13}$	$4.3x10^{-10}$	$3.0x10^{-10}$	$2.1x10^{-9}$
TCE	11000	8400 (27)	270	<6000 (27)	$3.7x10^{-5}$	-	0.6	.07 (27)	0.0026	0.0001-0.01	0.00021	0.0025	0.00021	0.0025

Modèle K

Nom :
SIMPLESAL

Type de modèle :
Modèle compartimental multimédia.

Référence :
Method 506, Draft Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods in Chemicals, OECD Chemicals Group and Management Committee, Hazard Assessment Panel (sous presse, 1988).

Personne-ressource :
D. van de Meent, National Institute of Public Health & Environmental Hygiene (RIVM), P.O. Box 1, 3720 BA Bilthoven, The Netherlands. Téléphone : 030-743130

Description
SIMPLESAL est un modèle compartimental, multimédia, basé sur la fugacité, et à tableur, que l'on peut utiliser pour estimer les teneurs dans des conditions constantes ou dépendantes du temps en composés organiques et en métaux lourds. Le modèle, qui détermine les voies et les processus prédominants des micropolluants dans l'environnement, a été conçu comme un outil de dépistage, afin de prédire les résultats de différents scénarios pour le contrôle des émissions de produits chimiques nouveaux et existants. Il considère les compartiments suivants : air, eau, solides en suspension, biote aquatique, sédiments et sol.

SIMPLESAL comporte quatre modules permettant de résoudre un ensemble simultané d'équations algébriques (conditions constantes) ou différentielles (conditions variables) :

i) un module pré-processeur pour la conversion des données d'entrée relatives aux propriétés physico-chimiques et environnementales en équations de bilan massique;

ii) un sous-programme d'inversion de matrice pour le calcul des concentrations dans des conditions constantes à partir d'un ensemble d'équations algébriques;

iii) un sous-programme d'intégration numérique pour le calcul des concentrations dynamiques; et

iv) un module graphique pour l'affichage des résultats.

On y trouve les processus suivants, lesquels sont illustrés à la figure K.1. :

i) flux advectifs dans l'air, l'eau et les matières en suspension;

ii) transfert diffusif entre air-eau, air-sol, et sédiments-eau;

iii) dépôt atmosphérique sec et humide, dépôt de sédiments, resuspension et enfouissement;

iv) bioconcentration dans la biote aquatique;

v) entraînement par lessivage du sol jusqu'aux eaux souterraines;

vi) dégradation par transformation biotique et abiotique.

Données requises
Les données requises incluent les dimensions et les propriétés des différents milieux ainsi que les taux d'émission dans les milieux en question; les temps de séjour dans l'air et dans l'eau; les paramètres du transfert entre les compartiments en association avec les particules; les propriétés physico-chimiques suivantes : solubilité dans l'eau, tension de vapeur et coefficient de partage octanol-eau; ainsi que les vitesses de dégradation pour les transformations biotiques et abiotiques.

Résultats
Les résultats sont obtenus soit sous forme soit de teneurs dans l'environnement (conditions constantes), soit sous forme de réponse dynamique aux variations d'émission, aussi bien que de vitesses de transfert entre les compartiments, de vitesses de transformation et de débits advectifs.

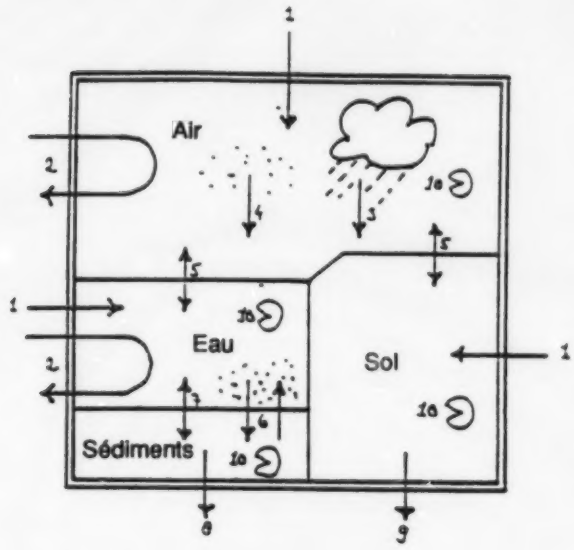
Applications
Le modèle a été appliqué avec succès à la proposition de gestion de l'environnement pour le benzène, le cadmium, le lindane et le cuivre aux Pays-Bas.

Ordinateur
La version pour conditions constantes du modèle fonctionne sur un ordinateur de type IBM-PC compatible en conjonction avec le tableur Lotus 1-2-3. La version dynamique requiert un compilateur Turbo-Pascal et un programme de simulation dynamique, FRAME, disponible sur disquette.

Disponibilité
Inconnue, mais on peut probablement l'obtenir assez facilement sur demande.

Commentaires
Il s'agit d'un modèle basé sur la fugacité, appliqué aux conditions propres aux Pays-Bas. Son principe est très similaire à celui des modèles canadiens de ce type.

Figure K.1
Processus du modèle SIMPLESAL



Processus inclus dans le modèle SIMPLESAL :
Émissions dans l'air, l'eau et le sol (1); importation et exportation advectives de et vers l'air et l'eau (2); échanges air-eau et air-sol par les dépôts humides (3), les dépôts secs ou les particules d'aérosol (4) et les échanges gazeux (5); échanges eau-sédiments par sédimentation et resuspension de la matière en particules (6) et échanges directs (7); enfouissement des sédiments (8); lixiviation dans le sol (9); dégradation abiotique et biotique (10).

Modèle L

Nom :

AERIS – Aid for Evaluating the Redevelopment of Industrial Sites

Type de modèle :

Modèle d'évaluation de risque multimédia fonctionnant au sein d'un environnement de programmation par système éprouvé.

Référence :

Contaminated Soil Cleanup in Canada – Volume 2: Development of the AERIS Model (Interim Report); doit être remplacé par le Volume 5 au courant de 1989.

Personnes-ressources :

Brett Ibbotson, SENES Consultants Limited, (416) 764-9386 ou Art Stelzig, Direction générale des programmes industriels, Environnement Canada, (613) 953-1134

Description

AERIS utilise des informations environnementales et toxicologiques pour estimer les expositions (et par conséquent les risques) potentielles des usagers ou des visiteurs d'un site suite à la présence de contaminants dans le sol. Pour les sites que l'on envisage de réaménager, les estimations de l'exposition peuvent servir à déterminer les lignes directrices de nettoyage du sol. L'aspect novateur du modèle AERIS réside dans le fait que les informations sur les contaminants, les usagers du site et l'environnement local sont assemblées dans un environnement de programmation par système expert convivial; cette intégration donne une approche cohérente pour l'établissement de lignes directrices en matière de sols.

AERIS est constitué de quatre éléments fondamentaux : un pré-processeur «intelligent», un ensemble de modules des composantes, un post-processeur et la base de données. Le pré-processeur est constitué d'une série de questions faciles à comprendre que pose AERIS à l'utilisateur du modèle relativement au scénario de réaménagement à l'étude. L'utilisateur peut soit répondre en fournissant les informations spécifiques au site, soit accepter les valeurs par défaut suggérées par le modèle. Si l'utilisateur ne sait pas comment répondre à une question spécifique, il peut obtenir à l'écran une explication ou une aide additionnelle. On dit que le pré-processeur est «intelligent» car il fait appel à la technologie des systèmes experts. Il utilise un ensemble de règles pour décider si les informations fournies sont suffisantes, pour aider l'utilisateur à estimer les paramètres d'entrée inconnus, pour détecter la présence d'erreurs dans les réponses à mesure qu'elles sont fournies, et pour contrôler le flux d'informations entre les autres éléments du système AERIS.

Le pré-processeur transmet les informations relatives au scénario de réaménagement fournies par l'utilisateur aux modules des composantes. Les modules sont constitués d'équations qui estiment les concentrations dans des conditions pseudo-constantes du contaminant dans les compartiments

environnementaux (tels que l'air et les eaux souterraines) en fonction de la concentration du contaminant dans le sol. Les teneurs dans l'environnement prédites sont ensuite utilisées pour estimer les doses auxquelles s'expose un usager du site par une voie donnée, par exemple l'inhalation d'air ou la consommation d'eau potable. Les doses provenant des différentes voies sont combinées pour estimer la dose totale, laquelle peut alors être comparée à une dose totale «admissible» selon les indications toxicologiques. La teneur admissible d'un contaminant dans le sol est celle qui produit une dose inférieure ou égale à la dose admissible.

Données requises

Les données requises dépendent du scénario devant être évalué. On dispose de valeurs par défaut et d'assistance à l'écran pour l'introduction des données à toutes les étapes du programme. Les données fondamentales devant être fournies comprennent les informations physico-chimiques et toxicologiques sur le contaminant à l'étude, la destination du site, les caractéristiques physiques et comportementales du récepteur (usager du site), la météorologie du site, les caractéristiques du sol et de la formation sous-jacente, ainsi que le régime des eaux souterraines.

Résultats

Toutes les teneurs dans l'environnement estimées, les doses pour chaque voie, ainsi que les estimations de la dose totale sont transmises au post-processeur, lequel propose à l'utilisateur différents formats de présentation tabulaire ou graphique pour afficher les résultats.

Applications

Compte tenu de l'absence de précédents dans l'établissement de lignes directrices en matière de sols, du mandat des responsables de la réglementation et des décisions pour la protection du public, de la sensibilisation croissante des propriétaires actuels et des propriétaires éventuels de sites vis-à-vis de leurs responsabilités, le modèle AERIS pourrait être appliqué à une vaste gamme de situations.

i) AERIS pourrait être utilisé par les organismes chargés de la réglementation auxquels on demande de valider le choix d'un site contaminé pour un usage proposé, afin de déterminer s'il est nécessaire d'entreprendre des travaux de décontamination, ou d'identifier les objectifs de la décontamination.

ii) AERIS pourrait être utilisé par les propriétaires actuels ou éventuels de sites désireux de savoir s'il est nécessaire de prendre des mesures correctrices et, le cas échéant, dans quelle mesure. Dans le cas des contaminants qui n'ont pas été étudiés par les organismes de réglementation, AERIS pourrait fournir une première approximation des lignes directrices en matière de décontamination, lesquelles pourraient ensuite être adoptées.

iii) AERIS pourrait être utilisé par les éducateurs pour montrer aux étudiants les relations dose-environnement en tant que moyen d'incorporer l'évaluation des risques dans le processus de prise de décisions.

Ordinateur

AERIS est conçu pour fonctionner sur des ordinateurs de type IBM PC XT, AT, PS/2 et compatibles. Les exigences minimales comprennent le matériel suivant :

i) unité de disque double face ou disque dur

ii) mémoire vive minimale de 256 Ko

iii) système d'exploitation PC-DOS/MS-DOS, version 2,0 ou supérieure

iv) co-processeur mathématique

Disponibilité

Pas encore disponible sur le marché. Les demandes doivent être adressées à Environnement Canada ou à SENES Consultants Limited.

Commentaires

AERIS n'est pas un modèle multimédia exhaustif, car les seules phases qu'il considère sont l'air, le sol et les eaux souterraines. Toutefois, le recours à un système expert pour aider l'utilisateur constitue une innovation qu'il convient de noter.

Modèle M

Type de modèle :

Modèle compartimental multimédia (MCM).

Référence :

i) Cohen, Y., Ryan, P.A. "Multimedia modelling of environmental transport: trichloroethylene test case", Environ. Sci. Technol. 19: 412-417, 1985.

ii) Ryan, P.A., Cohen, Y. "Multimedia transport of particle-bound organics: benzo(a)pyrene test case", Chemosphere 15: 21-47, 1986.

Personne-ressource :

Dr Y. Cohen, National Center for Intermedia Transport Research, University of California, Los Angeles, Los Angeles, CA 90024, USA. Téléphone :

Description

L'EPA américaine a subventionné une dizaine de centres pour l'étude de questions environnementales spécifiques, telles que les eaux souterraines ou les écosystèmes. L'un de ces centres, le NCITR à l'Université de Californie à Los Angeles (UCLA), est dirigé par le Dr Y. Cohen. Ce centre a acquis une expertise particulière dans le domaine de la pollution de l'air, en particulier les dépôts secs des aérosols, et a développé plusieurs modèles et approches de modélisation, la plupart portant sur les contaminants transportés par l'air. Les études décrites ci-dessous sont des exemples des travaux du centre; toutefois, il convient de surveiller de près ses autres programmes dans ce domaine.

Ce modèle multimédia décrit la distribution dynamique des polluants organiques dans un système à six compartiments, soit l'air, l'eau, le sol, les sédiments, les sédiments en suspension et la biote.

Il réunit les processus de transfert diffusif et non diffusif, les flux advectifs et convectifs et les réactions de premier ordre des différents compartiments. Dans le cas de l'advection de l'air, on a inclus un facteur de recirculation atmosphérique, lequel augmente le temps de séjour de l'air. Il peut être appliqué aux polluants liés à des particules ou aux polluants non aérosols. Les processus de lavage par les précipitations et de dépôt à sec sont quantifiés. La résolution d'un ensemble de six équations différentielles produit un profil concentration-temps pour chaque compartiment.

Données requises

Comme dans le cas d'autres modèles compartimentaux multimédias, les données d'entrée devant être fournies sont les propriétés des milieux, les propriétés physico-chimiques et thermodynamiques de la substance, les coefficients de partage et de transport, les conditions climatiques et la teneur de fond initiale ou les données relatives aux émissions.

Applications

Le modèle a été appliqué à l'évaluation du devenir du trichloroéthylène, et les résultats ont indiqué une concordance satisfaisante avec les données disponibles. Le modèle a également été appliqué avec succès à la distribution dynamique du benzo(a)pyrène dans le sud-est de l'Ohio. Dans la deuxième étude, le devenir du benzo(a)pyrène dans l'air, l'eau et le sol a été examiné pour les émissions continues et variables.

Ordinateur

En général, on utilise un ordinateur central.

Disponibilité

Peut probablement être obtenu assez facilement sur demande.

Commentaires

On ne peut pas encore obtenir de modèle complet et documenté auprès de ce groupe, bien qu'il est probable que de tels modèles seront produits prochainement. Les modèles considéreront sans doute les situations air-sol et comprendront peu d'éléments aquatiques, en rapport avec les conditions climatiques sèches de la Californie.

3. Évaluation critique

3.1 Tableau recapitulatif

Le tableau 3.1 est un tableau récapitulatif des modèles et de leurs caractéristiques. Il existe manifestement une grande diversité de types de modèles. Les modèles les plus complets sont les systèmes GEOTOX et TOXSCREEN, ce dernier étant vraiment une compilation de plusieurs modèles modulaires. Tous les processus essentiels susceptibles d'intéresser Santé et Bien-être social Canada ont été traités dans au moins un modèle. Par conséquent, on dispose de tous les éléments pour constituer un modèle approprié pour le Ministère, bien qu'ils ne soient pas encore intégrés en un seul système fonctionnel.

Il est possible d'examiner de manière bien détaillée, pour chaque modèle, le traitement de processus spécifiques comme la bioconcentration dans les poissons et l'eau ou l'inhalation. Toutefois, il est préférable de reporter cet examen détaillé à une date ultérieure, jusqu'au moment où l'on aura décidé quel modèle (ou quels modèles ou éléments de modèle) utiliser. Heureusement, cette étude n'est pas difficile, puisqu'elle demande la participation d'experts dans les différents domaines concernés.

À ce propos, nous formulons les commentaires suivants :

1. Une faiblesse importante de tous les travaux de modélisation est l'absence de données sur le rejet ou la source, c'est-à-dire la quantité en kg/année de produits chimiques rejetés. En vertu de la LCPE, cette lacune (qui ne dépend pas du modèle) doit être comblée.
2. La complexité des modèles de prévision du devenir dans l'environnement varie beaucoup de l'un à l'autre. Les plus simples sont en général des modèles basés sur la fugacité dans des conditions constantes, et les plus complexes expriment la concentration par des équations différentielles. Après une première phase de travail consacrée à la compréhension du concept de fugacité, leur utilisation sur une base régulière est plus facile.
3. Il existe encore des lacunes importantes dans les domaines suivants :
   ingestion de sol
   absorption par les plantes à partir du sol et de l'air
   échanges sédiments-eau
   inclusion de l'exposition dans les locaux
   inclusion de l'exposition sur les lieux de travail
   traitement des aliments importés par rapport aux aliments produits localement
   exposition cutanée
   caractérisation de modes de vie extrêmes
   absorption gastro-intestinale
   métabolisme humain
4. Plusieurs modèles, en particulier RAPS et GEOTOX, caractérisent l'absorption par les humains. L'approche adoptée pour la dioxine par Stevens/Wisconsin relative à la consommation par l'homme de végétaux et de produits laitiers est très intéressante. Les rapports de l'EPA traitent également cet aspect de manière approfondie. L'approche d'AERIS est supérieure pour les routes d'exposition menant du sol à l'homme.

Les expériences récentes ont montré que les modèles peuvent avoir un rôle inestimable dans la proposition de stratégies visant à réduire les niveaux de contamination chez l'humain et à éliminer les sources de contamination. Ils peuvent fournir des indications pour la surveillance de programmes, tant avant qu'après l'application des mesures correctrices. Il est maintenant possible de calculer la séquence intégrale des événements, de l'émission d'un produit chimique à sa dispersion dans l'environnement, son absorption dans les denrées alimentaires, sa consommation par l'homme et sa concentration dans les tissus humains. La décomposition de cette séquence est un processus long et difficile et demande de nombreux calculs complexes, mais elle est possible. Il est très encourageant de constater que, dans des cas comme celui de la dioxine, ces calculs ont été effectués, et que l'on a obtenu une concordance satisfaisante entre les concentrations observées dans les tissus humains et les concentrations calculées. La crédibilité de ces modèles en a été renforcée. Il est nécessaire de tenir compte, dans les évaluations de l'exposition, du risque que de faibles quantités du produit chimique puissent atteindre le récepteur humain par des voies non prévues. À des teneurs dans l'environnement très faibles, ces voies normalement ignorées peuvent devenir importantes; citons notamment l'inhalation de trihalométhanes en prenant une douche, et le transfert des dioxines du papier aux aliments.

Tableau 3.1
Tableau récapitulatif des modèles et de leurs caractéristiques

Catégorie		GEOTOX	RAPS	MNSEM	Persistance	EEP	ENPART	TOX-SCREEN	Exposition globale	PPLV	Fugacité	SIMPLE-SAL	NCTR	AERIS
Compartiment														
Air	- global	N	Y	Y	N	Y	Y	Y	N	N	Y	Y	Y	Y
	- vapeur	Y									Y			
	- particules	Y									Y			
Eau	- global	N	Y	Y	Y	Y	Y	Y	N	N	Y	Y	Y	Y
	- eau	Y			Y						Y			
	- poissons	Y			Y		Y	Y			Y			
	- crustacés				N						N			
	- sédiments en suspension	Y			Y		Y				Y			
Sol	- global	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	N	N	Y	Y	Y	Y
	- solides										Y			
	- air										Y			
	- eau										Y			
	- zone non saturée	Y									N			
	- zone saturée	Y									N			
Sédiments	- global	Y	Y	Y	Y	N	Y	N	N	N	Y	Y	N	N
	- solides										Y			
	- eau interstitielle										Y			
Eau souterraines		Y	Y	N	N	N	N	Y	N	N	N	N	N	N
Végétation		Y		N	N	N	N	Y	N	N	N	N	N	Y
Processus de transfert														
Transfert diffusif		Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y	N	N	Y	Y	Y	Y
	- air-sol	Y	N	Y	N	Y	Y				Y	Y	Y	Y
	- air-eau	Y	N	Y	N	Y	Y				Y	Y	Y	Y
	- sédiments-eau	Y	N	Y	Y	N	Y				Y	Y		N
Transfert non diffusif		Y		N	N	N	N	Y	N	N	Y	Y	Y	N
	- lavage par précipitations	Y	Y								Y	Y	Y	
	- dépôt humide	Y	Y								Y	Y	Y	
	- dépôt sec	Y	Y								Y	Y	Y	
	- ruissellement de surface	Y	Y								Y	N		
	- lessivage	Y	Y								Y	N		
	- dépôt des sédiments en suspension	Y	N								Y	Y		
	- resuspension des sédiments déposés	Y	N								Y	Y		

Tableau 3.1 (suite)

Catégorie	GEOTOX	RAPS	MNSEM	Persistence	EEP	ENPART	TOX-SCREEN	Exposition globale	PPLV	Fugacité	SIMPLE-SAL	NCITR	AERIS
Flux advectifs													
- entrant	N	N	N	N	N	N	Y	N	N	Y	Y	Y	N
- sortant	Y	N	N	N	N	N	Y	N	N	Y	Y	Y	N
Dégradation								N	N				
- biotique	Y	N	Y	Y	Y	N				Y	Y	Y	N
- abiotique	Y	N	Y	Y	N	N	Y			Y	Y	Y	N
NATURE DU MODÈLE													
- conditions constantes	Y	Y	Y	Y	Y	Y	Y			Y	Y	Y	Y
- conditions variables	Y		N	Y	N	N	Y			Y	Y	Y	N
VOIES D'EXPOSITION	Y	Y	N	N	N	N	N	Y	Y	Y	N	N	Y
Inhalation d'air								Y	Y				
- atmosphérique	Y	Y								Y			Y
- douches	N	Y								N			N
Ingestion d'eau								Y	Y				
- boissons	Y	Y								Y			Y
- bains	N	Y								N			N
- baignades	N	Y								N			N
Ingestion d'aliments													
- poissons	Y	Y						Y	Y	Y			N
- crustacés	N	Y								N			N
- cultures	Y	Y						Y	Y	Y			Y
- animaux domestiques	Y	Y						Y	Y	Y			N
Ingestion accidentelle de terre et d'eau	Y	Y								N			Y
Absorption cutanée	Y	Y								N			N
Autres activités	N	Y								N			N

Seuls les modèles de l'EPA considèrent de manière adéquate la préparation des aliments et le traitement de l'eau potable comme des méthodes permettant de réduire l'exposition. On ne sait pas exactement quelles sont les techniques donnant les meilleurs résultats, ni même si elles devraient être utilisées. On pourrait avancer que c'est à l'exposition *potentielle* que l'on s'intéresse, et pas nécessairement à l'exposition *réelle*.

3.2 Ces modèles peuvent-ils être utilisés dans le cadre de la LCPE?

Dans cette évaluation, nous procédons par questions et réponses, conformément au tableau récapitulatif.

L'un des modèles existants pourrait-il être mis immédiatement en application?

La réponse évidente est non. Aucun des principaux candidats, TOXSCREEN et GEOTOX, n'est conçu pour les conditions canadiennes. Toutefois, le modèle basé sur la fugacité, lorsque son module de calcul d'exposition sera terminé, sera un bon candidat.

L'un de ces modèles pourrait-il être modifié?

Seulement TOXSCREEN, GEOTOX et les modèles basés sur la fugacité sont adéquats.

TOXSCREEN est un ensemble vaste et complexe de plusieurs modèles de processus détaillés. La compréhension de l'ensemble du système constituerait un défi intellectuel important. On ne sait pas s'il pourrait être disponible. De surcroît, il est basé sur des données géographiques (hydrologie, météorologie, régions de recensement, etc.) recueillies auprès d'organismes américains tels que le Geological Survey et le Weather Service. Bien qu'il existe des organismes similaires au Canada, les données géographiques disponibles sont présentées sous une forme très différente, et il serait nécessaire de procéder à d'importantes modifications du programme. L'extraction et l'adaptation de TOXSCREEN aux conditions canadiennes constitueraient un travail important, notamment dans le domaine environnemental pour l'estimation de l'exposition.

Le système GEOTOX est plus prometteur. Il s'agit également d'un modèle vaste et complexe que seuls ses auteurs (en particulier le Dr Tom McKone) comprennent parfaitement. Les principales modifications qu'il faudrait apporter concerneraient les données topographiques propres aux États-Unis. Ce modèle comporte quelques faiblesses dans le traitement des régions où les masses d'eau ont une influence considérable, par exemple le bassin des Grands lacs et les régions maritimes, en particulier sur la côte est. Ce modèle pourrait être obtenu et modifié après signature d'un contrat et d'un accord de licence avec les auteurs.

Le modèle basé sur la fugacité, qui sera abordé plus loin, est complet en ce qui concerne l'estimation du devenir dans l'environnement, mais présente des lacunes sur le plan de l'évaluation de l'exposition complète.

En résumé, la modification de l'un de ces modèles américains existants est techniquement possible, mais demanderait l'affectation de ressources considérables, particulièrement dans le domaine de l'environnement.

Le tableau 3.2 annexé au présent rapport est un résumé des équations employées dans les modèles de l'EPA.

L'un de ces modèles pourrait-il être adopté et étendu pour répondre aux besoins de Santé et Bien-être social Canada?

Il existe plusieurs possibilités. Une option intéressante consisterait à ajouter à l'un des modèles simples d'exposition environnementale existants des conditions d'exposition humaine spécifiques au Canada, en ce qui concerne la consommation d'aliments et d'eau. S'il est nécessaire de minimiser les efforts consacrés à la modélisation environnementale, comme on l'a fait dans différents pays d'Europe et au Japon, on pourrait ajouter un module d'exposition «personnalisé». Il est moins difficile de modifier et d'étendre la portée des modèles existants que de partir de zéro.

À notre sens, la meilleure solution est de concevoir un modèle spécifique aux conditions canadiennes en adoptant les caractéristiques les plus intéressantes des modèles existants. On pourrait ainsi utiliser dans un contexte différent certaines des excellentes expressions de processus qui se trouvent dans des modèles tels que RAPS, AERIS, GEOTOX et TOXSCREEN.

À ce stade-ci, il est utile de faire une digression afin de se demander de quel type de modèle on a besoin. Il s'agit en définitive d'une question de politique pour le Ministère, mais nous formulons les commentaires suivants pour étude :

3.3 De quel type de modèle avons-nous besoin?

En premier lieu, il faut préciser comment les concepteurs de modèles voient leurs travaux. On se heurte souvent à des idées fausses ou à des attentes irréalistes sur la nature des modèles, ce qu'ils peuvent accomplir et avec quelle précision ils peuvent le faire.

3.3.1 La nature des modèles

Il est préférable de considérer les modèles comme des *aides* pour l'évaluation du comportement des produits chimiques. Ils aident à compenser notre incapacité mentale intrinsèque à mémoriser et à manipuler des volumes importants de données, et nous permettent d'estimer de manière quantitative les phénomènes liés à l'environnement et à l'exposition. Cependant, tout comme un grand nombre de moyens de transport différents (avions, automobiles, bateaux et bicyclettes) nous aident à nous déplacer d'un endroit à un autre, les différents modèles disponibles servent à diverses fonctions. Certains traitent de conditions constantes, d'autres de conditions variables, d'autres de facteurs régionaux, ou d'évaluation; certains sont d'une grande simplicité tandis que d'autres sont très complexes. Cette situation est pour les concepteurs tout à fait saine : l'utilisateur peut bénéficier d'une grande variété de modèles.

Un problème que l'on rencontre fréquemment est le manque d'attention apporté au choix du modèle. Si le modèle choisi se révèle inapproprié à la tâche, cela peut être décevant. La première étape clé est la formulation exacte de la question à laquelle le modèle doit répondre. Lorsqu'on utilise des modèles

pour tenter de répondre à des questions pour lesquelles ils ne sont pas conçus, les modèles et les modélisateurs acquièrent une mauvaise réputation.

Il existe de nombreux arguments en faveur du recours au modèle le plus simple. Cette opinion ne date pas d'hier. Du côté des modélisateurs, on s'inquiète beaucoup de ce que le nombre croissant de modèles disponibles incite à l'abus des individus qui emploient par inadvertance des modèles inadéquats et en tirent des interprétations erronées. Tout comme l'autorisationde conduire une voiture ou de procéder à l'ablation de l'appendice d'une personne n'est conféré qu'à des individus ayant suivi un cours de formation, le privilège d'avoir recours à des modèles pour fins de réglementation devrait requérir une certaine formation. Pour l'instant, le besoin de telles exigences en matière de formation n'a pas été reconnu.

Les résultats fournis par le modèle et les conclusions quantitatives qui en découlent devraient être faciles à interpréter et être vérifiables de préférence par un calcul relativement simple. Un rôle essentiel du modèle est de distinguer les processus importants des nombreux processus interreliés se produisant dans l'environnement et dans l'organisme humain. Une fois les processus principaux dégagés, il est souvent facile de faire des calculs relativement simples de, par exemple, la teneur ou la persistance, et d'en déduire le comportement prédominant du produit chimique. Il est fortement recommandé à l'utilisateur d'effectuer de telles évaluations après modélisation. On peut ensuite procéder à une analyse plus détaillée des processus constituant la voie d'exposition prépondérante, par exemple eau-poisson-ingestion sous la forme d'aliments.

3.3.2 Considérations sur la réglementation canadienne

Les auteurs ignorent de quelle manière Santé et Bien-être social Canada et le ministère de l'Environnement aborderont la question de la modélisation en vertu de la LCPE, mais il est clair que le Ministère ne sera pas enclin (et ce n'est pas son mandat) à entreprendre des calculs complexes de répartition dans l'environnement. À l'évidence, un effort conjoint et intégré s'impose, sur la base d'attentes et d'objectifs communs.

Santé et Bien-être social Canada pourrait choisir d'adopter un modèle d'étude de devenir dans l'environnement relativement simple et solide, similaire à ceux employés par l'OCDE, et y ajouter une composante d'évaluation de l'exposition propre aux caractéristiques canadiennes. Le ministère de l'Environnement pourrait alors modifier et élargir le modèle d'étude du devenir afin de satisfaire à ses besoins propres. À notre sens, il serait peu judicieux pour Santé et Bien-être social Canada d'attendre que le ministère de l'Environnement développe un modèle d'étude du devenir, car cela pourrait retarder l'ensemble du processus. Pour faciliter le démarrage du projet, il serait utile de disposer au minimum d'un simulacre de modèle de devenir, c'est-à-dire un modèle auquel il faut fournir les données d'entrée disponibles et qui génère les résultats requis à l'aide des expressions des modèles les plus appropriés, lesquelles ne sont pas nécessairement parfaitement validées ou justifiables. Même si les résultats sont relativement peu précis, le processus de modélisation aura pour le moins été entamé. L'application aux conditions canadiennes d'un des modèles d'étude du devenir existants requerrait relativement peu d'efforts.

L'effet des changements sur le plan du commerce international (par exemple GATT, libre-échange États-Unis-Canada) sur les besoins en matière d'évaluation des produits chimiques et de l'acceptabilité mutuelle des évaluations faites par des pays étrangers n'est pas clairement défini. La tendance est à l'«harmonisation», mais les États-Unis ne semblent pas pressés de réaliser cette harmonisation, par exemple avec l'OCDE. On ne sait pas si le Canada se comportera comme un partenaire commercial fort par rapport aux États-Unis.

Il convient de remarquer que l'EPA a investi plusieurs millions de dollars dans la mise au point de modèles au cours des dernières années. Il semblerait judicieux de demander l'opinion des experts de cet organisme et de mettre à profit leur expérience, tant au niveau scientifique qu'à celui de la réglementation. Les informations recueillies facilement accessibles au Ministère et se doivent d'être exploitées. Il est également souhaitable d'entretenir des contacts étroits avec certaines provinces, notamment l'Ontario, qui sont actives dans ce domaine.

3.3.3 Considérations sur la géographie canadienne

Les conditions prévalant au Canada sont très différentes de celles des autres pays :

(a) La superficie est très étendue et la densité moyenne de population est très faible, soit 1/10e de celle des États-Unis et 1/100e de celles des pays industrialisés de l'Europe. Il existe toutefois certaines régions à très haut niveau de densité de population et d'activités industrielles le long de la frontière Canada-États-Unis.

(b) Du fait que les températures sont généralement plus basses que celles enregistrées ailleurs, les caractéristiques de distribution des produits chimiques sont fondamentalement différentes de celles que l'on retrouve dans des climats plus chauds. On soulignera notamment le «toxic cold finger effect», se traduisant par des niveaux élevés de BPC dans les lipides des animaux de l'Arctique.

(c) Un élément important de l'identité canadienne est la perception nationale d'un pays polaire, froid et quasi-vierge, encore habité par des populations autochtones, doté d'une faune unique, et de régions pratiquement intactes pour la pêche et la chasse. La préservation de ces caractéristiques est importante pour les Canadiens; par conséquent, la compréhension de l'impact des produits chimiques sur les écosystèmes du Nord est une nécessité strictement propre au Canada. Il existe de nombreux arguments en faveur d'une évaluation spécifique aux «climats froids», laquelle étudierait les modes de vie originaux et les schémas de consommation d'aliments des habitants du Nord.

(d) Il existe une forte dépendance à l'égard des fruits et légumes importés des régions plus méridionales, dont le climat est plus favorable aux cultures.

(e) La contamination provenant par advection des États-Unis (transportée par les courants d'air et d'eau) exerce une forte influence sur notre pays. Les précipitations acides en sont la forme la plus remarquable, mais d'autres produits chimiques

sont «importés» en quantités appréciables. Tel n'est pas le cas dans les régions comme la Californie, laquelle reçoit l'advection relativement pure du Pacifique.

(f) Il existe des disparités régionales marquées sur le plan des types d'écosystèmes et d'écotones à travers le pays, ce qui rend très difficile l'évaluation des produits chimiques sur une base nationale. Pour illustrer cet aspect, la figure 3.1 est une carte du Canada divisée en cinq régions qui pourraient être considérées pour une évaluation séparée. Ce sont :

1 - la côte et les montagnes du Pacifique
2 - les prairies du sud
3 - les Grands lacs, le bassin du Saint-Laurent
4 - les provinces maritimes
5 - les régions du Nord

Cette délimitation ne correspond pas au tracé de frontières politiques. Compte tenu des disparités sur le plan des climats, des terrains, des modes de vie et des types de faune dans ces régions, il serait erroné de les considérer comme un tout. Ces régions diffèrent totalement sur le plan de la topographie, des populations et des activités industrielles. Par conséquent, l'exposition humaine aux produits chimiques varie certainement d'une région à l'autre.

3.3.4 Modèles basés sur la fugacité et la teneur

Plusieurs juridictions en Europe et en Amérique du Nord ont adopté et adapté l'approche de modélisation basée sur la fugacité, développée par les auteurs du présent rapport à l'Université de Toronto grâce à une subvention de l'EPA. En fin de compte, les modèles basés sur la fugacité et la concentration devraient donner des résultats similaires, et même identiques. La plupart des experts dans le domaine de l'exposition humaine et environnementale sont plus familiers avec les unités de concentration, bien que la fugacité soit de plus en plus employée, notamment en Allemagne, aux Pays-Bas et au Japon. Il est évident que les auteurs du présent rapport ne sont pas impartiaux dans ce domaine. Nous préconisons l'emploi des modèles basés sur la fugacité pour les raisons suivantes :

(a) Leur utilisation est très répandue dans d'autres juridictions.

(b) Des modèles de fugacité efficaces ont été développés pour certaines régions du Canada (l'Ontario et une partie du bassin des Grands lacs).

(c) L'application du concept de fugacité à la modélisation environnementale est une réussite canadienne.

(d) On dispose de modèles basés sur la fugacité pour des processus clés, notamment la bioconcentration et la pharmacocinétique humaine.

(e) L'avancement des travaux sur les modèles basés sur la fugacité est significatif pour l'absorption par les plantes de produits chimiques dans le sol et l'air. On pense qu'ils s'agit des modèles les plus perfectionnés dans cette catégorie.

(f) L'expérience accumulée au niveau local sur les modèles basés sur la fugacité est considérable.

Une option que l'on choisit souvent et qui encourage la créativité individuelle consiste à assigner la tâche de mise au point du modèle à plus d'un groupe. Les efforts sont ensuite regroupés et examinés, et on adopte la meilleure approche, ou une approche combinée. C'est ce qu'a récemment fait la International Joint Commission.

3.4 Que devrait faire Santé et Bien-être Social Canada?

Nous savons que Santé et Bien-être social Canada a pris en considération les facteurs énumérés ci-haut et a élaboré des principes directeurs relatifs à la modélisation, notamment les décisions concernant les ressources humaines et financières (tant internes que sous contrat) qui seront consacrées à cette tâche. Les ressources détermineront largement la portée des travaux et la complexité des modèles. Parmi les questions essentielles, citons les suivantes :

- rôle du ministère de l'Environnement
- disponibilité des modèles pour le public et l'industrie
- temps disponible pour l'évaluation
- considérations régionales
- complexité du modèle
- de quelle manière les modèles peuvent-ils être modernisés et avec quelle fréquence

Suggestion d'une procédure

Nous formulons les suggestions suivantes :

(a) Santé et Bien-être social Canada devrait adopter des modèles de calcul de devenir dans l'environnement relativement simples, similaires à ceux utilisés dans les pays européens. Cela pourrait se faire au moyen d'un contrat relativement modeste. Les modèles devraient traiter séparément au moins les cinq régions mentionnées précédemment.

(b) Santé et Bien-être social Canada devrait ajouter à ces modèles (soit par des ressources internes, soit par contrat) des modèles d'étude de l'exposition des humains, en exploitant les informations disponibles sur la population et les modes de vie. En raison des disparités dans les habitudes de vie, ce traitement devrait établir des distinctions entre les groupes d'âge : nourrissons, enfants, adolescents et adultes.

(c) Il serait important de rester en contact étroit avec les autres concepteurs de modèles et de solliciter leur opinion, notamment ceux aux États-Unis et en Europe, de sorte que les approches de modélisation choisies au Canada reflètent les derniers progrès accomplis dans ce domaine.

Les exercices d'intercalibration de modèles s'avéreraient particulièrement utiles pour faire en sorte que les évaluations faites au moyen de différents systèmes dans d'autres juridictions produisent des résultats similaires, ou encore différents pour une raison explicable. Par exemple, on pourrait définir un ensemble commun de propriétés physico-chimiques et de caractéristiques d'utilisation pour les produits chimiques choisis X, Y et Z, lesquels pourraient être évalués indépendamment par les différents groupes. La comparaison des résultats devrait montrer une grande similarité. Il s'agit du même principe que celui utilisé pour les analyses chimiques.

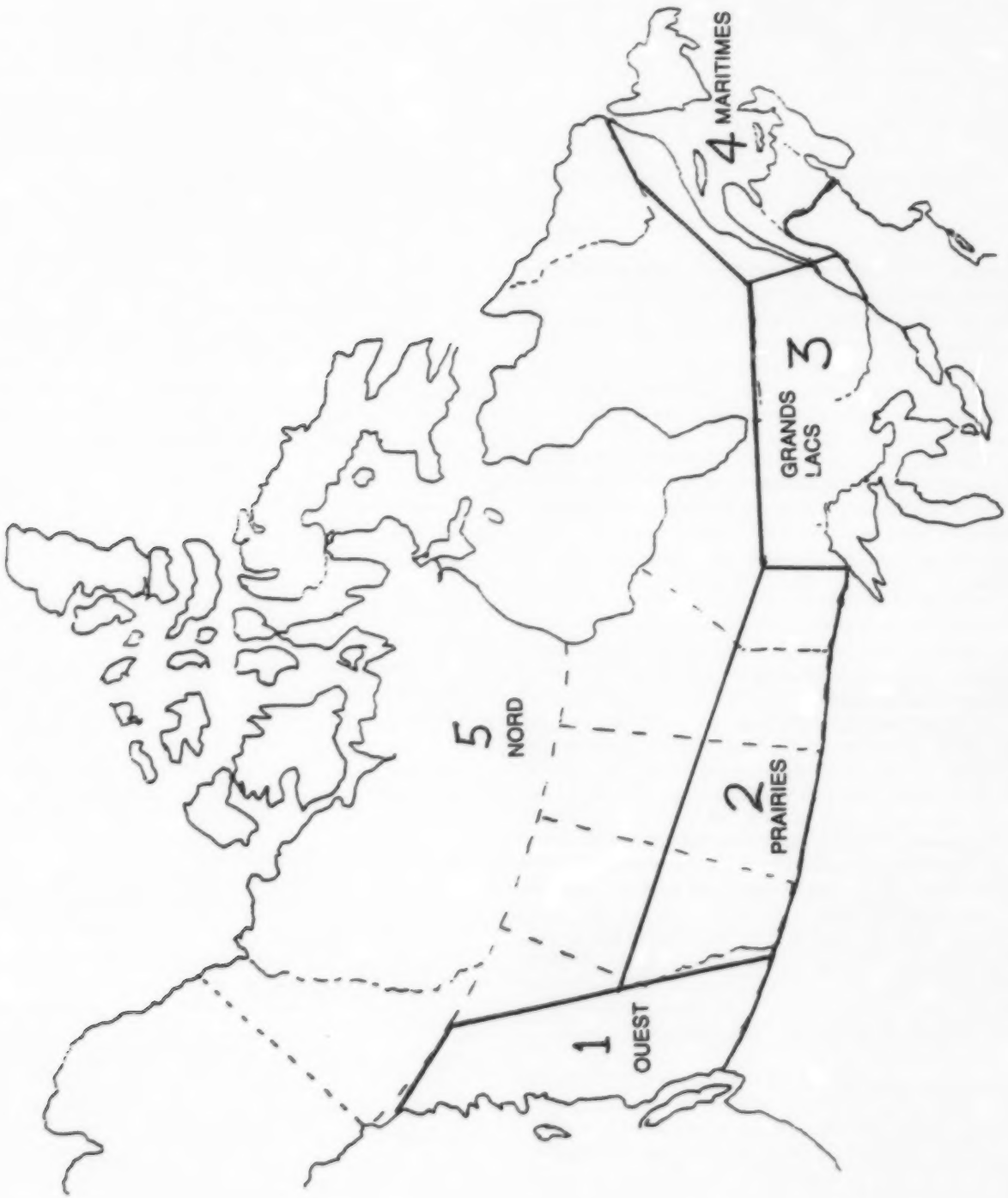
(d) Les modèles et les méthodes employés devraient être totalement accessibles à l'utilisation et aux commentaires du public, des universités, de l'industrie et des autres intervenants intéressés.

(e) Lorsque les modèles deviennent disponibles, il convient de consacrer des ressources financières et humaines aux analyses et aux examens indépendants par des pairs, et d'assurer la formation et le support par une personne accessible qui connaît assez bien le modèle pour répondre aux questions concernant sa structure. La stratégie adoptée par le laboratoire d'Athens de l'EPA, lequel offre un support pour les modèles tels que MINTEQ, est un excellent exemple à suivre. La promotion des modèles ne prend pas fin avec l'envoi d'une disquette ou d'une bande magnétique. Le modèle requiert des efforts continus de validation, de formation, de documentation et de communication. Malheureusement, ces services sont coûteux et nombre d'organismes sont peu enclins à fournir de telles ressources. On pourrait affirmer que, si des décisions en matière de réglementation doivent être fondées sur des modèles, les responsables des décisions au gouvernement se doivent d'exiger ce type de support. Ce n'est que de cette manière que l'on pourra mettre sur pied un système crédible et impartial d'évaluation des produits chimiques en vertu de la LCPE.

(f) Lors du calcul des expositions, il est préférable de faire les estimations en utilisant aussi bien les valeurs numériques individuelles que les distributions des valeurs. Le public profane et les médias attachent souvent une trop grande importance aux chiffres qui sont générés et mettent l'accent sur les situations les plus pessimistes. Santé et Bien-être social Canada devrait rechercher des méthodes permettant de communiquer les chiffres de manière plus évocative, de sorte que l'on ne puisse pas mal interpréter la précision et l'importance des résultats, ni exagérer les niveaux d'exposition.

On rencontre un problème similaire lorsqu'il s'agit de faire la description des doses admissibles ou acceptables. Peut-être les règlements devraient-ils préciser dans quelle mesure un intervalle ou une distribution d'exposition théorique concorde avec la gamme de niveaux que l'on estime dangereuse (ou non dangereuse). Dans le cas des produits chimiques existants, cette précision pourrait être appuyée par une déclaration selon laquelle on cherche constamment à réduire l'exposition aux produits chimiques toxiques. Il est peu probable que le public accepte que l'on affirme que l'exposition à la dioxine à un niveau de Y ng/jour est «acceptable». Les gens sont plus enclins à accepter que l'on estime qu'une exposition de 100 unités/jour n'a pas d'effets sur la population en général, en particulier si l'on explique parallèlement que les expositions actuelles varient de 5 à 25, et que l'on cherche à identifier les sources de 5 à 25 et à les réduire d'un facteur de 5 au cours des prochaines années. Souvent, cette réduction peut nécessiter des changements de mode de vie, notamment dans l'utilisation des produits chimiques domestiques. Ceux qui veulent bénéficier d'une exposition réduite disposent alors des connaissances nécessaires pour changer leur mode de vie en conséquence.

Figure 3.1
Suggestion pour la délimitation de régions en vue de l'évaluation au Canada



4. Conclusions

Nous avons entrepris une étude des modèles existants d'estimation du devenir dans l'environnement et de l'exposition des humains, et avons exposé les caractéristiques de chacun d'entre eux.

Aucun modèle disponible actuellement ne peut être adopté immédiatement par Santé et Bien-être social Canada pour l'évaluation de l'exposition potentielle des personnes aux nouveaux produits chimiques.

Nous suggérons que le Ministère développe un modèle ou une approche de modélisation applicable aux conditions propres au Canada, en modifiant les modèles de devenir dans l'environnement et d'exposition humaine existants, et en exploitant les caractéristiques les plus intéressantes de ces derniers.

L'adaptation de l'approche bien établie de la fugacité pour l'évaluation du devenir dans l'environnement, comme on l'a fait en Europe et au Japon, permettrait au Ministère d'entreprendre immédiatement l'addition de la phase d'évaluation de l'exposition.

Plusieurs questions relatives aux politiques ont été exposées et brièvement traitées. Ces problèmes devraient être résolus dans les premiers stades de la mise au point du modèle. Les points suivants revêtent une importance particulière :

1. les ressources (personnes et moyens financiers) devant être consacrées à la mise au point et au suivi du modèle,
2. les rapports avec le ministère de l'Environnement,
3. les répercussions internationales, en particulier avec les États-Unis et la CEE.

Compte tenu du fait que la modélisation du devenir dans l'environnement et de l'exposition est en évolution constante, il est souhaitable que l'approche choisie soit entièrement accessible aux commentaires du public et des industries, ainsi qu'à l'examen par la communauté scientifique.

Références et Bibliographie

Asher, S.C., Lloyd, K.M., Mackay, D., Paterson, S., et Roberts, J.R. A critical examination of environmental modelling – modelling the fate of chlorobenzenes using the persistence and fugacity models, NRCC. No. 23990. NRCC's Associate Committee on Scientific Criteria for Environmental Quality.

Baes, C.F., Sharp, R., Sjoreen, A., et Stor, R. 1984. A review of analysis of parameters for assessing environmentally released radionuclides through agriculture, ORNL-5786.

Bennett, B.G. 1981a. The exposure commitment method in environmental pollutant assessment. Environ. Monit. and Assessment, *1*, 21-36.

Bennett, B.G. 1981b. Exposure commitment assessments of environmental pollutants, Vol. 1, No. 1, MARC Report 23, Monitoring and Assessment Research Centre, Londres, Angleterre.

Bennett, B.G. 1981c. Exposure commitment assessments of environmental pollutants, Vol. 1, No. 2, MARC Report 25, Monitoring and Assessment Research Centre, Londres, Angleterre.

Bennett, B.G. 1983. Exposure of man to environmental PCBs – an exposure commitment method. Sci. Tot. Environ., *29*, 101-114.

Burns, L.A., Cline, D.M., et Lassiter, R.R. 1981. Exposure analysis modelling systems (EXAMS): User manual and system documentation. Athens, GA:US EPA Environmental Research Laboratory.

Calamari, D., Vighi, M., et Bacci, E. 1987. The use of terrestrial plant biomass as a parameter in the fugacity model. Chemosphere, *16*, 2359-2364.

Cohen, Y. 1986. Organic pollutant transport. Environ. Sci. Technol., *20*, 538-544.

Cohen, Y., et Ryan, P.A. 1985. Multimedia modelling of environmental transport: trichloroethylene test case. Environ. Sci. Technol., *19*, 412-417.

Contaminated Soil Cleanup in Canada – Volume 2: Development of the AERIS Model (Interim Report), Canadian Council of Resource and Environment Ministers (CCREM); scheduled to be superseded by Volume 5 in mid-1989.

Dacre, J.C., Rosenblatt, D.H., et Cogley, D.R. 1980. Preliminary pollutant limit values for human health effects. Environ. Sci. Technol., *14*, 777-783.

Experimental Exposure Potentials (EEP), Method 503, Draft Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods in Chemicals, OECD Chemicals Group and Management Committee, Hazard Assessment Panel (sous presse 1988).

Environmental Partitioning Model Draft Documentation, Office of Toxic Substances, US EPA, 1982.

Environmental Partitioning Model (ENPART), Method 505, Draft Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods in Chemicals, OECD Chemicals Group and Management Committee, Hazard Assessment Panel (sous presse 1988).

Geyer, H., Scheunert, I., et Korte, F. 1987. Distribution and bioconcentration potential of the environmental chemical pentachlorophenol (PCP) in different tissues of humans. Chemosphere, *16*, 887-899.

Geyer, H., Scheunert, I., et Korte, F. 1986. Bioconcentration potential of organic chemicals in humans. Regulatory Toxicol. Pharmacol., *6*, 313-347.

Hetrick, D.M., et McDowell-Boyer, L.M. 1983. User's manual for TOXSCREEN: A multi-media screening level program for assessing the potential fate of chemicals released to the environment. Draft Report. Oak Ridge National Laboratory ORNL/TM-8570. Washington, DC: Office of Pesticides and Toxic Substances, US EPA (Contract No. W-7405-eng-26).

Jones, K.C., et Bennett, B.G. Human exposure to environmental polychlorinated dibenzo-p-dioxins and dibenzofurans: an exposure commitment assessment for 2,3,7,8-TCDD. Sci. Total Environ. (sous presse).

Kay, S.V., Hoffman, F.O., McDowell-Boyer, L.M., et Baes, C.K. 1981. Development and application of terrestrial food chain models to assess health risks to man and releases of pollutants to the environment. IAEA-SM-254/63.

Klein, W., Kördel, W., Klein, A.W., Kuhnen-Clausen, D., et Weiss, M. 1988. Systematic approach for environmental hazard ranking of new chemicals. Chemosphere, *7*, 1445-1462.

Klöpffer, W., Ripper, G., et Frische, R. 1982. Physicochemical properties as useful tools for predicting the environmental fate of organic chemicals. Ecotoxicol. Environ. Saf., *6*, 294-301.

Mackay, D. 1979. Finding fugacity feasible. Environ. Sci. Technol., *13*, 1218-1223.

Mackay, D. et Paterson, S. 1988. Partitioning models, *in* Carcinogen Risk Assessment, Ed. C.C. Travis, Plenum Pub., 7786.

Mackay, D., et Paterson, S. Evaluating the regional multimedia fate of organic chemicals: A level III fugacity model. Environ. Sci. Technol. (présenté en 1988).

Mackay, D., et Paterson, S. 1982. Fugacity Revisited. Environ. Sci. Technol., *16*, 654-660.

Mackay, D., et Paterson, S. 1981. Calculating fugacity. Environ. Sci. Technol., *15*, 1006-1014.

McCall, P.J., Laskowski, D.A., Swann, R.W., et Dishburger, H.J. 1983. Estimation of environmental partitioning in model ecosystems. Res. Rev., *85*, 231-244.

McDowell-Boyer, L.M., et Hetrick, B.M. 1982. A multimedia screening level model for assessing the potential site of chemicals released to the environment, Oak Ridge National Lab., TN 8334, 56 p.

McKone, T.E., et Layton, D.W. 1986. Screening the potential risks of toxic substances using a multimedia compartment model: estimation of human exposure. Reg. Toxicol. Pharmacol., *6*, 359-380.

Michigan Department of Natural Resources, Environmental Protection Bureau, Environmental Services Division, Critical Materials Register, 1979, Michigan DNR, Lansing MI., Pub. No. 4833-5323.

Multi-Phase Non-Steady State Equilibrium Model (MNSEM), Method 507, Draft Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods for Chemicals, OECD Chemicals Group and Management Committee, Hazard Assessment Panel (sous presse 1988).

Conseil national de recherches du Canada. 1981. A screen for the relative persistence of lipophilic organic chemicals in aquatic ecosystems. An analysis of the role of a simple computer model in screening. Report of the NRCC's Associate Committee on Scientific Criteria for Environmental Quality. Rep. No. NRCC 18570, 300 p.

OECD, Chemicals Group and Management Committee, Hazard Assessment Panel, Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods for Chemicals (sous presse 1989).

Ott, W.R. 1985. Total human exposure. Environ. Sci. Technol., *19*, 880-886.

Paterson, S., et Mackay, D. 1987. A steady-state fugacity-based pharmacokinetic model with simultaneous multiple exposure routes. Environ. Toxicol. Chem., *6*, 395-408.

Paterson, S., et Mackay, D. A model illustrating the environmental fate, exposure and human uptake of persistent organic chemicals. Ecolog. Modelling (sous presse 1989).

Rosenblatt, D.H., Dacre, J.C., et Cogley, D.R. 1980. An environmental fate model leading to preliminary pollutant limit values for human health effects, *in* Environmental Risk Analysis for Chemicals, Ed. R.J. Conway, New York: Van Nostrand Reinhold.

Ryan, P.A., et Cohen, Y. 1986. Multimedia transport of particle-bound organics: benzo(a)pyrene test case. Chemosphere, *15*, 21-47.

SIMPLESAL, Method 506, Draft Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods in Chemicals, OECD Chemicals Group and Management Committee, Hazard Assessment Panel (sous presse 1988).

Stevens, J.B., et Gerbec, E.N. 1980. Dioxin in the agricultural food chain. Risk Anal., 8, 329-335.

TOXSCREEN, Method 604, Draft Compendium of Environmental Exposure Assessment Methods in Chemicals, OECD Chemicals Group and Management Committee, Hazard Assessment Panel (sous presse 1988).

Travis, C.C., et Arms, A.D. 1988. Bioconcentration of organics in beef, milk and vegetation. Environ. Sci. Technol., *22*, 271-274.

Travis, C.C., et Hattemer-Frey. 1987. Human exposure to 2,3,7,8-TCDD. Chemosphere, *16*, 2331-2342.

Whelan, G., Strange, D.L., Droppo, J.G., Jr., Steelman, B.L., et Buck, J.W. 1987. The remedial action priority system (RAPS): mathematical formulations, prepared for the U.S. Department of Energy, Office of Environment, Safety and Health.

Wood, W.P., Nold, I.A., et Lefler, J. 1982. Environmental Partitioning Model (Draft Documentation), General Software Corp., Landover, MD.

Yoshida, K., Shigeoka, T., et Yamauchi, F. 1988. Estimation of environmental fate of industrial chemicals. Toxicol. Environ. Chem., *17*, 69-85.

Annexe

Tableau 3.2 – Résumé des méthodes quantitatives

Voies	Équations	Définitions	Commentaires	Références
VOIES VERS ANIMAUX (Section B.2)				
Ingestion d'eau ou d'aliments contaminés	$C_T = (BF_f)(F)C_D$	C_T = concentration du produit chimique dans les tissus (µg/kg) BF_f = facteur de bioconcentration (base des graisses) pour l'organisme en question (µg/kg graisse)/(µg/kg d'alimentation) F = teneur en graisses du tissu (kg graisse/kg tissu) C_D = concentration du polluant dans l'alimentation (ou l'eau potable) (µg/kg)		
	Méthode 1 $\log BF_f$ = -1,476-0,495 log S = -3,457+0,500 log K_{ow} = -3,825+0,701 log K_{oc} = -3,839+0,869 log BCF_f = -2,8422+0,674 log BCF_t	S = solubilité dans l'eau (ppm) K_{ow} = coefficient de partage octanol-eau K_{oc} = coefficient d'adsorption d'eau de carbone organique BCF_f= facteur de bioconcentration chez le poisson dans les essais en eau courante BCF_t = facteur de bioconcentration chez le poisson dans les systèmes d'eaux terrestres statiques	Régression à l'aide de 23 produits chimiques, principalement des herbicides et pesticides chlorés, et gammes étendues de valeurs pour les valeurs indépendantes. Critiquée par Garten et Trabalka (1983) du fait de l'utilisation de données douteuses. Les intervalles de confiance s'étendaient sur pratiquement 4 ordres de grandeur.	Kenaga (1980)
	Méthode 2 $\log K_{ow} \leq 3,5$; pas de bioaccumulation appréciable dans les graisses, c'est-à-dire $BF_f < 0,3$ log S >4; pas de bioaccumulation appréciable dans les graisses; $BF_f < 0,03$.	Comme ci-haut.	Niveaux de criblage seulement. Taux d'erreur de faux positifs ou de faux négatifs de 25% avec 68 produits chimiques. Ne peut s'appliquer aux produits chimiques pouvant établir des liaisons covalentes avec des protéines plutôt qu'avec des graisses.	Garten et Trabalka (1983)
Inhalation des polluants dans l'air	Pas de méthode disponible			
Absorption dermique	$F_S = K_S \Delta C$	F_S = Flux ou vitesse de pénétration dans la peau (mg/cm^2-heure) K_S = constante de perméabilité (L/cm^2-heure) ΔC = différence de concentration de part et d'autre de la peau (mg/L)	Loi de Fick.	Brown et col. (1984)

Résumé des méthodes quantitatives (suite)

Voies	Équations	Définitions	Commentaires	Références
	$K_{si} = K_{sj} (MW_j/MW_i)^{1/2}$	K_{si} = constante de perméabilité du produit chimique i (L/cm^2-heure) K_{sj} = constante de perméabilité du produit chimique j (L/cm^2-heure) MW_i = poids moléculaire du produit chimique i MW_j = poids moléculaire du produit chimique j		U.S. EPA (1985)
VOIES VERS POISSONS/CRUSTACÉS (Section B.3)				
	$C_{ao} = (BCF)C_w$	BCF = facteur de bioconcentration dans les poissons (µg/kg, µg/L) C_{ao} = concentration du polluant chez l'organisme aquatique à l'équilibre (µg/kg) C_w = concentration du polluant dans l'eau (µg/L)		
	Méthode 1 log BCF = 0,76 log K_{ow}-0,23	K_{ow} = coefficient de partage octanol-eau	Régression avec 84 produits chimiques et K_{ow} entre 7,9 et 8,1 × 10^6.	Bysthe (1982)
	= 2,791-0,564 log S	S = solubilité dans l'eau (ppm)	Régression avec 64 produits chimiques et S entre 0,001 et 50 000 ppm.	
	= 1,119 log K_{oc}-1,579	K_{oc} = coefficient d'adsorption du sol (ou sédiment)	Régression avec 13 produits chimiques et K_{oc} compris entre 1 et 1,2 × 10^6. Grande diversité de classes de produits chimiques représentées par les équations, mais quelques espèces de poissons seulement.	
	Méthode 2 BCF = 0,048 K_{ow}	Comme ci-haut	Utilisé par le programme de dépistage de niveau TOXSCREEN de l'EPA.	Mackay (1982)
VOIES VERS CULTURES (Section B.4)				
Absorption par l'air				
	Méthode 1 $C_p = C_a RT/H$	C_p = concentration du polluant dans la plante (µg/ml) C_a = concentration du polluant dans l'air (µg/ml) H = constante de la loi de Henry (m^3 atm/mol) R = constante des gaz parfaits ($8,2 \times 10^{-5}$ m^3 atm/mol °K T = température (°K)	Théorique, non testé avec des données expérimentales empiriques.		

Résumé des méthodes quantitatives (suite)

Voies	Équations	Définitions	Commentaires	Références
	Méthode 2			
	$C_p = \frac{r}{Y_v \quad \lambda_{ei}} [1-(1-e^{-\lambda ei^t e})/(\lambda_{ei} t_e)]$	r = fraction de réception initiale déterminée empiriquement	Équation dérivée de l'interception des radionucléides.	Chamberlain 91970)
	x (vitesse de dépôt)	Y_v = productivité de la végétation (g/m^2) λ_{ei} = constante d'altération empirique ($jour^{-1}$) t_e = période de croissance des cultures avant la récolte ou la pâture (jours) vitesse de dépôt (g/m^2-jour)	Bon nombre de valeurs empiriques requises, lesquelles sont inconnues pour les produits chimiques organiques.	
Absorption par les racines				
	Méthode 1 $RCF = C_R/C_{ex}$	RCF = facteur de concentration dans les racines C_R = concentration dans les racines (µg/ml) C_{ex} = concentration dans la solution externe (µg/ml)		Briggs et col. (1982)
	$TSCF = C_w/C_{ex}$	TSCF = facteur de concentration par courant de transpiration C_w = concentration dans le courant de transpiration (µg/ml) C_{ex} = concentration dans la solution externe (µg/ml)		Briggs et col. (1982)
	$\log (RCF-0,82) = 0,77 \log K_{ow}-1,52$ $TSCF = 0,784 \exp-((\log K_{ow}-1,78)^2/2,44))$ RCF = 0,82 (pour les espèces polaires)	K_{ow} = coefficient de partage octanol-eau	Équations de régression pour 18 composées (O-méthyl-carbamoyloximes non ioniques et phénylurées substituées) dans les pousses d'orge germées dans des solutions nutritives. La physiologie des racines ou le métabolisme rapide dans les racines peuvent entraîner des valeurs de TSCF inférieures aux valeurs prédites.	Briggs et col. (1982)
	Méthode 2 $RCF_s = C_R/C_s$ $TSCF_s = C_w/C_s$ $\log (RCF_s K_{oc}(OC)-0,82) = 0,77 \log K_{ow} -1,52$ $TSCF_s K_{oc} (OC) = 0,784 \exp-((\log K_{ow}-1,78)^2/2,44)$ $RCF_s K_{oc} (OC) = 0,82$ (pour les espèces polaires)	C_s = concentration totale dans le sol (µg/cm³) Autres définitions comme ci-haut K_{oc} = coefficient d'adsorption du sol OC = carbone organique fractionnaire (g/g) Autres définitions comme ci-haut.	Comme ci-haut	D'après Briggs et col. (1982)

Résumé des méthodes quantitatives (suite)

Voies	Équations	Définitions	Commentaires	Références
	Méthode 3 $C_{pl} = BC_{pl} \times C_o$ $K_d = K_{oc}$ (%OC) $\ln K_d = A+B \ln (BC_{pl})$ ou $\ln (K_{oc}$ (%OC) = A+Bln(BC_{pl})	C_{pl} = concentration dans les parties mûres de la plante (mg/g poids sec) BC_{pl} = facteur de bioconcentration dans les parties mûres de la plante C_o = concentration dans le sol (mg/g poids sec) K_d = coefficient de partage sol-eau K_{oc} = coefficient d'adsorption du sol %OC= pourcentage de carbone organique A et B sont des constantes empiriques	Utilisé dans le programme de dépistage de niveau TOXSCREEN de l'EPA. Les valeurs de A et B utilisées pour TOXSCREEN sont 3,02 et -0,85 respectivement, selon une étude de la littérature sur 21 éléments.	USEPA (1984b)
VOIES VERS STADES ALIMENTS APRÈS RÉCOLTE (Section B.5)				
Aliments en contact avec air, eau ou liquide				
	Diffusion : $F = -D(dC/dx)$	F = flux massique du polluant selon la direction × ($\mu g/cm^2.s$) D = coefficient de diffusion du polluant dans l'air de l'aliment ($cm^2.s$) C = concentration du polluant dans le milieu (mg/ml) dC/dx =gradient de concentration selon la direction × (µg/mL.cm)	Loi de Fick	
	De l'air à l'air de l'aliment $F_1 = D_{fa}^*(C_a-C_{fa})/r$	F_1 = flux massique du polluant à travers la surface de l'aliment (µg/cm.sec) D_{fa}^* - coefficient de diffusion apparent du polluant dans l'air de l'aliment (cm^2/s) C_a = concentration du polluant dans l'air (µg/ml) C_{fa} = concentration du polluant dans l'air de l'aliment (µg/ml) r = rayon approximatif de la particule d'aliment (cm)	Un grand nombre de variables indépendantes doivent être estimées. Les équations additionnelles pour l'estimation de ces pramètres sont présentées à l'annexe B ou dans les références indiquées.	
	$D_{fa}^* = D_a(n_{air}^{10/3}/n_f^2)$	D_a = coefficient de diffusion du polluant dans l'air (cm^2/s) n_{air} = porosité remplie d'air de l'aliment (ml/ml) n_f = porosité (totale) de l'aliment (ml/ml)		
	$n_{air} = n_f - m$	m = teneur en eau de l'aliment (ml/ml)		
	$\overline{F}_1 = F_1/2$ pour $C_{fa} = 0, t = 0$ s	$\overline{F}_1$ = flux massique moyen du polluant à travers la surface ($\mu g/cm^2.s$)	Estimations de la concentration moyenne dans l'aliment. La concentration varie dans l'espace et avec le temps d'exposition. Ne considère par le dépôt de particules.	
	$C_t = C_i + (\overline{F}_1 At)/M$	C_t = concentration du polluant dans l'aliment après le temps t (µg/kg) C_i = concentration initiale du polluant dans l'aliment (µg/kg) t = temps (secondes) M = masse de l'aliment (kg) A = aire de l'aliment (cm^2)		

Résumé des méthodes quantitatives (suite)

Voies	Équations	Définitions	Commentaires	Références
	Du liquide externe au liquide de l'aliment			
	$F_2 = D_{fm}^*(C_{el}-C_{fm})/r$	F_2 = flux massique du polluant à travers la surface de l'aliment ($\mu g/cm^2.s$) D_{fm}^* = coefficient de diffusion apparent dans l'humidité de l'aliment (cm^2/s) C_{el} = concentration du polluant dans le liquide externe ($\mu g/ml$) Cfm = concentration du polluant dans l'humidité de l'aliment (mg/ml) r = rayon approximatif de la particule d'aliment (cm)	Un grand nombre de variables indépendantes peuvent devoir être estimées. Les méthodes d'estimation sont fournies à l'annexe B ou dans les références indiquées.	
	Équations similaires à celles de la diffusion de l'air à l'air de l'aliment.	Équations similaires à celles de la diffusion de l'air à l'air de l'aliment.	Estimations de la concentration moyenne dans l'aliment. La concentration varie dans l'espace et avec le temps d'exposition.	
	PARTAGE			
	Partage humidité-solides			
	$S = x/M = KC_{el}^{1/n}$	S = concentration du contaminant adsorbé sur les particules alimentaires ($\mu g/g$ d'aliment) x = masse de polluant adsorbé dans/sur l'aliment (μg) M = masse de l'aliment (g) K = coefficient d'adsorption (partage) ($\mu g/g$)($\mu g/ml$) C_{el} = concentration du polluant dissout dans le liquide externe ($\mu g/ml$) n = paramètre isotherme de Freundlich	Équations adaptées d'équations similaires dérivées pour les sols organiques et supposées valides pour les aliments. On suppose l'équilibre.	
	$K = K_{ow}$ (% lipide)/100	K_{ow} = coefficient de partage octanol-eau		
	Partage humidité-air			
	$C_{fa} = F_{cm}H/RT$	C_{fa} = concentration dans l'air de l'aliment ($\mu g/ml$) C_{fm} = concentration dans l'humidité de l'aliment ($\mu g/ml$) H = constante de la loi de Henry (m^3 atm/mol) R = constante des gaz parfaits ($8,2 \times 10^{-5}$ m^3 atm/mol °K) T = température °K)	D'après la loi de Henry applicable aux solutions diluées. Théorique. Les solutions d'aliments ne sont en général pas diluées.	

Résumé des méthodes quantitatives (suite)

Voies	Équations	Définitions	Commentaires	Références
Aliments en contact avec les surfaces	$M_t = 2C_{op}(D_p t/\pi)^{1/2}$	M_t = quantité ayant migré au temps t (g/cm^2) C_{op} = concentration initiale du produit chimique à la surface (g/cm^3) D_p = coefficient de diffusion effectif à travers la surface (cm^2/s) t = temps de contact de l'aliment avec la surface (s)	Pour les surfaces poreuses, par exemple les sols, donne la quantité maximale de produit chimique qui pourrait migrer vers l'extérieur.	Schwope et col. (1984)
	$D_p = D_a (n_{air}^{10/3}/n_s^2)$	D_a = coefficient de diffusion du polluant dans l'air (cm^2/s) n_{air} = porosité de surface remplie d'air (ml/ml) n_s = porosité totale de surface (ml/ml)		
	$C_f = 2C_{op}(D_p t/\pi)^{1/2} A_f/V_f$	C_f = concentration moyenne du produit chimique dans l'aliment (g/cm^3) A_f = aire de l'aliment en contact avec la surface (cm^2) Vf = volume de l'aliment (cm^3)	Donne la concentration maximale moyenne dans l'aliment. Les concentrations varieraient dans l'espace.	
	La concentration maximale est limitée par : $K = K_{ow}$ (% lipide)/100	K = coefficient d'adsorption (partage) ($\mu g/g$)($\mu g/ml$) K_{ow} = coefficient de partage octanol-eau	Suppose l'équilibre.	
Additifs	$C_f = C_i + \frac{C_a M_a}{M_f + M_a}$	C_f = concentration finale du polluant dans l'aliment ($\mu g/kg$) C_i = concentration initiale du polluant dans l'aliment ($\mu g/kg$) C_a = concentration du polluant dans l'additif ($\mu g/kg$) M_a = masse de la substance ajoutée (kg) M_f = masse d'aliment auquel la substance a été ajoutée (kg)	Il faut connaître la concentration de la substance dans l'additif et la masse d'additif.	
PERTES CHIMIQUES (Section B.6)				
	Similaire aux équations pour les voies vers le stade aliment après récoltes.			

Références de l'annexe

Briggs, G.G., Bromilow, R.H., et Evans, A.A. 1982. Relationships between lipophilicity and root uptake and translocation of non-ionized chemicals by barley. Pestic. Sci., *13*, 485-504.

Brown, H.S., Bishop, D.R., et Rowan, C.A. 1984. The role of skin absorption as a route of exposure for volatile organic compounds (VOCs) in drinking water. Am. J. of Pub. Health, *74* (5), 479-484.

Bysshe, S.E. 1982. Bioconcentration factors in aquatic organisms. In Handbook of Chemical Property Estimation Methods, Ed. W.J. Lyman, W.F., Reehl, and R.H. Rosenblatt. New York:McGraw Hill.

Chamberlain, A.C. 1970. Interception and retention of radioactive aerosols by vegetation. Atmos. Environ., *4*, 57-78.

Garten, C.T., Jr., et Traballka, J.R. 1983. Evaluation of models for predicting terrestrial food chain behavior of xenobiotics. Environ. Sci. Technol., *10*, 590-595.

Kenaga, E.E. 1980. Correlation of bioconcentration factors of chemicals in aquatic and terrestrial organisms with their physical and chemical properties. Environ. Sci. Technol., *14*, 553-556.

Schwope, A.D., Lyman, W.J., et Reid, R. 1984. Methods for assessing exposure to chemical substances. Methodology for estimating the migration of chemical substances from solid matrices. Report to US EPA, Office of Toxic Substances, Exposure Evaluation Division, Contract No. 68-01-6271. EPA 560/5-85-015.

US EPA. 1984. U.S. Environmental Protection Agency. User's manual for TOXSCEEN: A multimedia screening-level program for assessing the potential fate of chemicals released to the environment. Oak Ridge National Laboratory ORNL-6041, Washington, D.C.: US EPA, Office of Toxic Substances, EPA-560/5-83-024.

US EPA. 1985. U.S. Environmental Protection Agency. Methods for assessing environmental pathways of food contamination. Vol. 8, Methods for assessing exposure to chemical substances. EPA-560/5-85-008.